

GEORGE LUCAS SANTANA DE MOURA

MÉTODOS DE CONCORDÂNCIA OU COINCIDÊNCIA ENTRE
MODELOS: SIMULAÇÃO E APLICAÇÃO A DADOS DE
CRESCIMENTO DE PLANTA DE ALHO

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa como partes das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística Aplicada e Biometria, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

Orientador: Paulo Roberto Cecon

VIÇOSA - MINAS GERAIS

2020

**Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade
Federal de Viçosa - Campus Viçosa**

T

M929m
2020

Moura, George Lucas Santana de, 1995-
Métodos de concordância ou coincidência entre modelos
simulação e aplicação a dados de crescimento de planta de alho /
George Lucas Santana de Moura. – Viçosa, MG, 2020.
53 f. : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Orientador: Paulo Roberto Cecon.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de viçosa.
Referências bibliográficas: f.51-53.

1. Análise de regressão. 2. Modelos de crescimento.
3. Modelos de simulação. I. Universidade Federal de viçosa.
Departamento de Estatística. Programa de Pós-Graduação em
Estatística Aplicada e Biometria. II. Título.

CDD 22 ed. 519.536

GEORGE LUCAS SANTANA DE MOURA

MÉTODOS DE CONCORDÂNCIA OU COINCIDÊNCIA ENTRE
MODELOS: SIMULAÇÃO E APLICAÇÃO A DADOS DE
CRESCIMENTO DE PLANTA DE ALHO

Dissertação apresentada à Universidade Federal de
Viçosa como partes das exigências do Programa de
Pós-Graduação em Estatística Aplicada e Biome-
tria, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

APROVADA: 18 de fevereiro de 2020.

Assentimento:

George Lucas Santana de Moura

George Lucas Santana de Moura

Autor

Paulo Roberto Cecon

Paulo Roberto Cecon

Orientador

AGRADECIMENTOS

A Deus e ao seu filho senhor Jesus Cristo pela misericórdia e pelo fôlego de vida.

Aos meus pais, José Raimundo e Francisca Santana pela força, apoio e paciência.

A Universidade Federal de Viçosa.

Ao professor Paulo Roberto Cecon pelo zelo, paciência, dedicação, confiança e conhecimento.

Ao grande amigo Ricardo Magalhães (Zé) por todos esse anos de amizade e estudos desde a graduação.

Ao grande amigo Adenis Silva pelo companheirismo, dicas, troca de idéias e noites de estudos.

Ao amigo Carlos Ayallas pelas dicas no \LaTeX e pela grande inspiração para os estudos de linguagem de programação.

A amiga Flávia Lazzaretti pelos dias de conversa, dicas e discussões proveitosas.

Ao trio Edcarlos Miranda, Ademir Silva e Vinícius dos Santos por todo o apoio.

A república Curva de Rio pelo acolhimento.

Ao PPESTBIO e especialmente ao Júnior pelo exemplo de profissionalismo.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil(CAPES) - Código de Financiamento 001.

RESUMO

MOURA, George Lucas Santana de, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, fevereiro de 2020. **Métodos de concordância ou coincidência entre modelos: Simulação e aplicação a dados de crescimento de planta de alho.** Orientador: Paulo Roberto Cecon.

O objetivo deste trabalho foi realizar um estudo de simulação de vários métodos de concordância ou coincidência entre modelos, e utilizar-se destes métodos como critério para comparação de modelos de regressão não linear aplicados ao acúmulo de massa seca total da planta de alho em função do tempo. O critério de Akaike, critério de identidade de modelos e Erro Quadrático Médio são alguns critérios utilizados para comparação entre varios modelos de regressão, este trabalho propõe utilizar-se de índices como de Willmott, Nash-Sutcliffe e para verificar o grau de concordância entre os modelos de regressão não linear Logístico e Gompertz. Os 89 acessos de alho são oriundos do Banco de Germoplasma de Hortaliças da Universidade Federal de Viçosa(BGH/UFV), foi escolhido convenientemente apenas o acesso de alho que mais se adequa aos modelos citados, foram utilizados apenas estes dois modelos sigmoidais porque os critérios de concordância apresentados aqui são utilizados dois a dois. O estudo de simulação revelou que nenhum índice sozinho pode substituir os demais. No acesso de alho escolhido, todos os índices apresentaram valores concordantes.

Palavras-Chave: Análise de Regressão, Modelos de crescimento, Análise por simulação.

ABSTRACT

MOURA, George Lucas Santana de, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, February, 2020. **Concordance or coincidence methods between models: Simulation and application of garlic plant growth data.** Adviser: Paulo Roberto Cecon.

The aim of this work was to carry out a simulation study of several methods of agreement or coincidence between models, and to use these methods as a criterion for comparing nonlinear regression models applied to the accumulation of total dry mass of the garlic plant as a function of time. The Akaike criterion, model identity criterion and mean squared error are some criteria used to compare various regression models. This work proposes to use indexes such as Willmott, Nash-Sutcliffe and Lin to verify the degree of agreement between the Logistic and Gompertz non-linear regression models. The 89 accessions of garlic come from the Vegetable Germplasm Bank of the Federal University of Viçosa (BGH / UFV), only the access of garlic that best suits the mentioned models was conveniently chosen, only these two sigmoidal models were used because the criteria of agreement presented here are used two by two. The simulation study revealed that no single index can replace the others. In the chosen garlic accession, all indexes presented concordant values.

Keywords: Regression Analysis, Growth models, Simulation Analysis.

LISTA DE FIGURAS

1	Diferença gráfica entre dados perfeitamente concordantes e correlacionados	39
2	Gráfico de Bland Altman	39
3	Resultados Gráficos dos índices de Willmott(linha preta) vs. Willmott modificado(linha azul) vs. Willmott refinado(linha vermelha) considerando $\rho = 13/16$	40
4	Resultados Gráficos dos índices de Willmott original(linha preta) vs. Willmott modificado(linha azul) vs. Willmott refinado(linha vermelha) considerando $\rho = 3/16$	41
5	Resultados gráficos para os índices de Nash-Sutcliffe(linha preta) vs. Nash-Sutcliffe modificado(linha vermelha) considerando $p = 13/16$	42
6	Resultados gráficos para os índices de Nash-Sutcliffe(linha preta) vs. Nash-Sutcliffe modificado(linha vermelha) considerando $\rho = 3/16$	44
7	Resultados gráficos dos índices de Camargo & Sentelhas(linha preta) e Alvares et al.(linha vermelha) para $\rho = 13/16$	46
8	Resultados gráficos dos índices de Camargo & Sentelhas e Alvares et al. para $\rho = 3/16$	48
9	Modelos logístico e Gompertz ajustados	50
10	Convergência dos índices em relação ao tamanho de n	51
11	Gráfico de Bland & Altman de $\hat{Y}_{logístico}$ e $\hat{Y}_{Gompertz}$	52

LISTA DE TABELAS

1	Tabela de Desempenho de Camargo & Sentelhas	24
2	Tabela de Desempenho de Alvares et al.	25
3	Medidas descritivas dos valores de d para $\rho = 13/16$	34
4	Medidas descritivas dos valores de d_{mod} para $\rho = 13/16$	35
5	Medidas descritivas dos Valores de d_{ref} para $\rho = 13/16$	35
6	Medidas descritivas dos Valores de d para $\rho = 3/16$	36
7	Medidas descritivas dos Valores de d_{mod} para $\rho = 3/16$	37
8	Medidas descritivas dos Valores de d_{ref} para $\rho = 3/16$	37
9	Medidas descritivas dos Valores de NS para $\rho = 13/16$	42
10	Medidas descritivas dos Valores de NS_{mod} para $\rho = 13/16$	43
11	Medidas descritivas dos Valores de NS para $\rho = 3/16$	45
12	Medidas descritivas dos Valores de NS_{mod} para $\rho = 3/16$	45
13	Classificação percentual dos valores de desempenho de Camargo & Sente- lhas para $\rho = 13/16$	46
14	Classificação percentual dos valores de desempenho de Alvares et al. para $\rho = 13/16$	47
15	Classificação percentual dos valores de desempenho de Camargo & Sente- lhas para $\rho = 3/16$	48
16	Classificação percentual dos valores de desempenho de Alvares et al. para $\rho = 3/16$	49
17	Chutes iniciais(β_i^a), estimativas dos parâmetros($\hat{\beta}_i$), Soma de quadrado do resíduo(SQres) e passos até a convergência	51
18	Estimativas dos Parâmetros da Regressão linear com e sem intercepto($\hat{\beta}_i$) com seus respectivos valor p(p) e percentual do Erro Quadrático Médio sistemático(EQMs) e não sistemático(EQMn)	53

CONTEÚDO

1	Introdução	10
2	Objetivos	12
3	Referencial Teórico	13
3.1	Concordância entre dois métodos	13
3.2	Coefficiente de Correlação de Pearson	13
3.3	Teste t pareado	14
3.4	Análise de Regressão Linear	16
3.4.1	Regressão Linear Simples	16
3.4.2	Regressão linear simples sem intercepto	18
3.5	Gráfico de Bland-Altman	20
3.6	Índices de concordância de Willmott	20
3.6.1	Índice de concordância de Willmott(1985)	20
3.6.2	Índice de concordância de Willmott modificado	21
3.6.3	Índice de concordância de Willmott refinado (2012)	21
3.7	Índices de erro	21
3.8	Índices de Desempenho	24
3.8.1	Índice de desempenho de Camargo & Sentelhas (1997)	24
3.8.2	Índice de desempenho de Alvares <i>et al.</i> (2013)	24
3.9	Coefficiente de correlação e concordância(CCC)	25
3.10	Índices de Nash Sutcliffe	26
3.10.1	Índice de Eficiência de Nash-Sutcliffe	26
3.10.2	Índice de Eficiência de Nash-Sutcliffe modificado	26
3.11	Regressão não Linear	27
3.11.1	Método de Newton	28
3.11.2	Modelo Logístico	29
3.11.3	Modelo de Gompertz	30
3.12	Distribuição Normal Multivariada	32
4	Estudo por simulação	33
4.0.1	Cenário 1 - Willmott(d) vs. Willmott modificado(d_{mod}) vs. Willmott refinado(d_{ref})	34
4.0.2	Cenário 2 - Nash-Sutcliffe vs. Nash-Sutcliffe Modificado	42
4.0.3	Cenário 3 - Índice de desempenho de Camargo & Sentelhas e Alvarez et al.	46

5	Aplicação à dados de crescimento de planta de alho	50
5.0.1	Ajuste do Modelo Logístico e Gompertz	50
5.0.2	índices de Willmott original, corrigido e refinado, Nash-Sutcliffe original e modificado, Coeficiente de Lin e Coeficiente de Pearson . . .	51
5.0.3	Gráfico de Bland-Altman	52
5.0.4	Regressão Linear com e sem intercepto e Erro Quadrático médio. .	52
6	Conclusão	54
7	Referências	55

1 Introdução

A ciência desenvolve, evolutivamente, pesquisas, acontecimentos e progressos. Em face de tais situações, as pesquisas científicas, peculiarmente, exigem descrever algumas estimativas que demonstre, em certa medida, grandeza, pois quando depara-se com resultados de um experimento é fundamental validar as hipóteses científicas formuladas por meio da observação de um fenômeno(JUNG, 2009). Na etapa da experimentação, as estimativas podem ser discretas(p. ex. número de pessoas classificadas em determinado grupo) ou contínuas(p. ex. área foliar de uma planta), esta última com a contribuição de equipamentos de medição digital ou analógicos.

Os instrumentos de medição, com o passar dos anos, inovaram tecnologicamente com o objetivo de obter estimativas mais precisas, menos invasivas ou menos dispendiosas(OLIVEIRA, 2016). Tal cenário contribuiu para medir as grandezas existentes com distintos equipamentos, entretanto essa pluralidade de equipamentos naturalmente gera dúvidas na decisão de qual equipamento seria o mais adequado para realizar análises que ofertam ferramentas estatísticas.

Um exemplo, atualmente utilizado, na Agrometeorologia, é a mediação de radiação solar (WM - 2), sendo esta medida por um sensor ou por uma equação de diferença de ondas curtas e longas (SILVA ET AL. 2015), engloba também Agrometeorologia, a evapotranspiração que contribui para medição eficiente do vapor de água em uma superfície de vegetação, utilizam-se também equipamentos para esta medição sendo eles: Estação meteorológica, Lisímetro de pesagem ou Irrigâmetro (TAGLIAFERRE, 2006).

Corroborando com tais argumentos, que exemplificam como ocorrem a medição, o referencial teórico da presente pesquisa tem como intuito delinear tal situação. Todavia, nesta situação, particularmente, será discriminado a diferença entre a correlação e concordância de variáveis. Acredita-se que duas variáveis bem correlacionadas é uma condição necessária, mas não suficiente, ou seja, duas variáveis perfeitamente correlacionadas não necessariamente são perfeitamente concordantes, entretanto a recíproca é verdadeira, porque uma boa concordância é um caso especial de uma boa correlação. Tal situação será ilustrada e provada matematicamente e graficamente. Ademais, cabe salientar que de todos os métodos utilizados, apenas o coeficiente de Pearson, utilizado isoladamente pode ser enganoso para os propósitos de análise concordância.

Com intuito de analisar tais aspectos, foi utilizado como material, o alho (*Allium sativum* L.), é uma hortaliça tuberosa utilizada no mundo todo na culinária como tempero e devido a suas propriedades químicas, utiliza-se também na conservação de alimentos e

para fins medicinais(BLOCK, 2010).

A matéria seca da planta é definida como a quantidade de material restante de um organismo vegetal após a perda de toda a sua água através de algum processo laboratorial(BRITO, 2017). O material restante pode ser utilizado em biocombustíveis e em insumos para agropecuária, neste trabalho foi utilizado a massa seca total de planta como variável resposta.

O crescimento de plantas e algumas de suas características como, altura, matéria seca e área foliar, seguem um comportamento sigmoidal. No início, o crescimento de células e órgãos seguem um padrão exponencial (lei de crescimento natural) até que as interações mútuas entre indivíduos provocam uma inflexão no crescimento e a curva toma forma de um sigmóide(REIS, 1978). Verifica-se, por meio do banco de dados(BGH/UFV), que a maioria dos gráficos de dispersão apresentam comportamento sigmoidal, por tais motivos que foram escolhidos os modelos sigmoidais logístico e Gompertz.

A simulação de dados possui definições variadas com diferentes enfoques. A definição que melhor explica este trabalho é: Um recurso computacional utilizado para estudar propriedades de alguma metodologia estatística e ter noção de sua generalidade em diferentes situações. Os métodos estatísticos utilizados na simulação foram os índices de Willmott, o de Nash-Sutcliffe e o de Lin, pois se tratam de métodos numéricos. Apenas o método Bland-Altman é analisado graficamente, o que resulta em uma dificuldade nos estudos de simulação, ao passo que alguns componentes deste método somente podem ser analisado por gráfico.

Cabe destacar ainda que todos os métodos estatísticos são válidos para dados pareados, ou seja, deverá ser trabalhado com apenas dois equipamentos ou modelos de regressão, trabalhar com n modelos demanda um total de $\binom{n}{2}$ procedimentos. Ademais, algumas literaturas descrevem que os critérios usualmente para comparar modelos de regressão não-linear, geralmente, são o Critério de Akaike (AIC) e o Critério de informação Bayesiano (BIC), Soma de Quadrados do Resíduo e coeficiente de determinação ajustado, neste trabalho a Soma de Quadrados do Resíduo foi escolhido para complementar a análise de concordância dos modelos.

2 Objetivos

1. Fazer um levantamento dos métodos utilizados para avaliar concordância ou coincidência entre dois modelos e realizar um estudo de simulação para verificar se algum método sozinho, ou um conjunto deles, pode(m) substituir os demais;
2. Aplicar métodos estatísticos às estimativas provenientes de dois modelos de regressão não linear Gompertz e Logístico no crescimento de planta de alho, com a finalidade de verificar a sua concordância.

3 Referencial Teórico

3.1 Concordância entre dois métodos

Dois métodos ou modelos são ditos concordantes quando estes estimam suficientemente a mesma coisa. Dado o conjunto de pares de dados $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ sendo x_i os valores obtidos por um método A e y_i os valores obtidos por um método B, os dois métodos são perfeitamente concordantes quando $x_i = y_i \forall i \in \mathbb{N}$. Quando isto acontece uma função que intercepta todos os pontos é uma função afim e o ângulo dela é 45° .

1. $f(x) = x$
2. $\theta = \arctg \left[\frac{d}{dx} f(x) \right] = 45^\circ$

3.2 Coeficiente de Correlação de Pearson

O coeficiente de Pearson(ρ) é uma medida adimensional que afere o grau de associação linear entre duas variáveis, o coeficiente varia entre -1 e 1 sendo, 1 uma correlação linear positiva perfeita e -1 uma correlação linear negativa perfeita e 0 sem correlação linear. O coeficiente é dado da seguinte forma (FERREIRA, 2018):

$$\rho = \frac{COV(X, Y)}{\sqrt{V(X)V(Y)}}$$

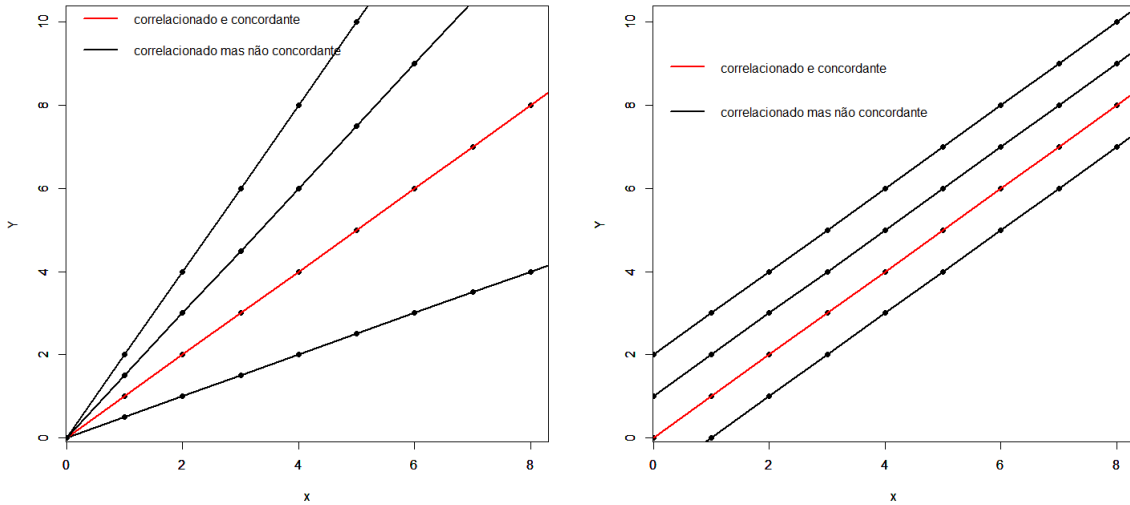
Cujo estimador é definido por:

$$r = \frac{\sum_{i,j=1}^n x_i y_i - n\bar{x}\bar{y}}{\sqrt{\left(\sum_{i=1}^n x_i^2 - n\bar{x}^2\right) \cdot \left(\sum_{i=1}^n y_i^2 - n\bar{y}^2\right)}} = \frac{SP_{XY}}{\sqrt{SQ_X SQ_Y}} \quad (1)$$

O numerador mede o total de concentração dos pontos nos quatro quadrantes (Bussab & Morettin, 2017), ou seja, a média dos produtos dos valores centrados das variáveis, isto é o que chamamos de covariância.

Uma boa correlação linear entre as variáveis é uma condição necessária, mas não suficiente para se ter um boa concordância, isto pode ser verificado na figura 1 em que todos os dados possuem $r = 1$ independente do deslocamento angular e escalar. pode-se notar também que apesar de todos serem perfeitamente correlacionados só a reta vermelha é perfeitamente concordante pois satisfaz as duas condições de concordância descritas na seção (3.1):

Figura 1: Diferença gráfica entre dados perfeitamente concordantes e correlacionados



Prova: As retas que interceptam os pontos no gráfico anterior são representadas por uma função afim:

$$f(x) = ax + b$$

Considerando $Y = aX + b$ onde X e Y são v.a. e a, b constantes conhecidas, aplicando no coeficiente de Pearson,

$$\begin{aligned} p &= \frac{COV(X, Y)}{\sqrt{V(X)V(Y)}} = \frac{COV(X, aX + b)}{\sqrt{V(X)V(aX + b)}} = \frac{COV(X, aX) + COV(X, b)}{\sqrt{a^2V^2(X) + V^2(X)V(b)}} \\ &= \frac{aCOV(X, X)}{|a|V(X)} = \frac{aV(X)}{aV(X)} = 1 \text{ se } a \geq 0 \end{aligned}$$

Percebe-se que, independente do deslocamento angular e linear da reta, o coeficiente de Pearson mantém o mesmo valor, isto demonstra que o coeficiente de correlação de Pearson usado sozinho é enganoso para verificação de concordância e é necessário estar acompanhado de outros índices.

3.3 Teste t pareado

Uma forma de verificar se duas amostras dependentes (pareadas) são estatisticamente diferentes ou não é por meio do Teste t pareado, que também é usado para verificar a concordância entre modelos.

Considerando os pares $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ que são, respectivamente, os valores antes e depois de uma intervenção, definimos $D_i = x_i - y_i$ e consideremos $D_i \sim N(\mu_D, \sigma_D^2)$. A estatística do teste é da seguinte forma,

$$t_{cal} = \frac{\bar{D} - \mu}{\frac{S_D}{\sqrt{n}}} \sim t_{(n-1)} \quad (2)$$

Prova:

Utilizando os seguintes fatos:

- $\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n Z_i \sim N(0, 1)$; $Z_i = \left(\frac{X_i - \mu}{\sigma} \right)$ e $X \sim N(\mu, \sigma^2)$
- $\frac{(n-1)S_{n-1}^2}{\sigma^2} \sim \chi_{n-1}^2$
- $\frac{N(0, 1)}{\sqrt{\frac{\chi_n^2}{n}}} \sim t_n$

$$t = \frac{\frac{\sum_{i=1}^n Z_i}{\sqrt{n}}}{\sqrt{\frac{(n-1)S_{n-1}^2}{(n-1)\sigma^2}}} = \frac{\frac{\sum_{i=1}^n X_i - n\mu}{\sqrt{n}\sigma}}{\sqrt{\frac{S_{n-1}^2}{\sigma^2}}} = \frac{\sqrt{n}(\bar{X} - \mu)}{\sqrt{S_{n-1}^2}} = \frac{(\bar{X} - \mu)}{\frac{S_D}{\sqrt{n}}} \sim t_{n-1}$$

Em que,

$$\bar{D}: \text{Médias dos } D_i. \quad \bar{D} = \frac{\sum_{i=1}^n D_i}{n}$$

$$S_D: \text{Desvio padrão dos } D_i. \quad S_D^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (D_i - \bar{D})^2}{n-1}$$

As hipóteses testadas são as seguintes,

$$\begin{cases} H_0 : \mu_D = 0 \\ H_1 : \mu_D \neq 0 \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{cases} H_0 : \mu_D = 0 \\ H_1 : \mu_D < 0 \text{ ou } \mu_D > 0 \end{cases}$$

Rejeita-se H_0 caso o valor p seja menor que um dado nível de significância(α), ou seja,

$$\text{valor } P \leq \alpha; \quad \text{valor } p = P(T^* \geq |T_{calc}|)$$

Tradicionalmente, deseja-se verificar se dois métodos são concordantes ou não, logo os testes usados são bilaterais.

3.4 Análise de Regressão Linear

3.4.1 Regressão Linear Simples

A Regressão Linear Simples associa variáveis independentes com dependentes através de um modelo estatístico, é dita linear por se tratar de uma combinação linear dos parâmetros, e dita simples por apresentar uma única variável independente. Os valores X são os valores preditores e Y são os valores preditos. O modelo estatístico é da seguinte forma:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \varepsilon_i; \quad i = 1, 2, 3, \dots, n \quad (3)$$

Y : Variável resposta;

X : Variável independente;

β_0 : Intercepto;

β_1 : Coeficiente de regressão;

ε : Erro experimental.

O estimador dos parâmetros β_0 e β_1 podem ser obtidos por máxima verossimilhança, método dos momentos e mínimos quadrados.

A análise de regressão deve satisfazer 3 pressuposições importantes (JÚNIOR, 2012):

1. Normalidade do erro. $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$
2. Os erros são independentes. $Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0 \quad \forall i \neq j$
3. A variância do erro experimental é a mesma para todas as observações (Homocedasticidade). $Var(\varepsilon|x_{1,i}, \dots, x_{p,i}) = \sigma^2$.

A seguir algumas provas:

- O estimador dos parâmetros é expresso da seguinte forma:

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i - n \bar{x} \bar{y}}{\sum_{i=1}^n x_i^2 - n \bar{x}^2} \quad \text{e} \quad \hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}$$

Prova:

A equação 3 pode ser escrita como um modelo linear de Gauss-Markov logo, $Y \sim N(\beta_0 + \beta_1 x_i, \sigma^2)$

Assim $f(y|\beta) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i}{\sigma}\right)^2}$ é função de verossimilhança com o Score:

$$l(\beta|y_i) = \sigma^{-n}(2\pi)^{-\frac{n}{2}} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i}{\sigma} \right)^2.$$

Encontrando o ponto de máximo da função:

$$\frac{\partial l(\beta|y_i)}{\partial \beta_0} = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i) = 0$$

$$\frac{\partial l(\beta|y_i)}{\partial \beta_1} = \sum_{i=1}^n (x_i y_i - \hat{\beta}_0 x_i - \hat{\beta}_1 x_i^2) = 0$$

Como as derivadas parciais do modelo não dependem de β Obtemos o seguinte sistema de equações normais(MAZUCHELI & ACHCAR, 2002):

$$\begin{cases} n\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i \\ \hat{\beta}_0 \sum_{i=1}^n x_i + \hat{\beta}_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{cases}$$

A solução do sistema é dado por:

$$\hat{\beta}_{0_{MAV}} = \bar{y} - \hat{\beta}_{1_{MAV}} \bar{x} \quad \text{e} \quad \hat{\beta}_{1_{MAV}} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i - n\bar{x}\bar{y}}{\sum_{i=1}^n x_i^2 - n\bar{x}^2}$$

- O teste t sobre os parâmetros é da seguinte forma:

$$t(\hat{\beta}_0) = \frac{\hat{\beta}_0 - \beta}{S_e} \sqrt{\frac{n \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^n x_i^2}}$$

$$t(\hat{\beta}_1) = \frac{\hat{\beta}_1 - \beta}{S_e} \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}$$

prova:

Sabendo-se de alguns itens:

1. $\hat{\beta}_0 \sim N\left(\beta_0, \frac{\sigma_e^2 \sum_{i=1}^n x_i^2}{n \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}\right)$
2. $\hat{\beta}_1 \sim N\left(\beta_1, \frac{\sigma_e^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}\right)$
3. $Z = \frac{\hat{\beta}_i - \beta}{\sqrt{Var(\hat{\beta}_i)}} \sim N(0, 1)$
4. $\frac{(n-2)S_e^2}{\sigma_e^2} \sim \chi_{(n-2)}^2$; $S_e^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n-2}$
5. $\frac{N(0, 1)}{\sqrt{\frac{\chi_n^2}{n}}} \sim t_n$

Então:

$$t(\hat{\beta}_0) = \frac{\frac{\hat{\beta}_0 - \beta}{\sqrt{\text{Var}(\hat{\beta}_0)}}}{\sqrt{\frac{(n-2)S_e^2}{\sigma_e^2}}}{\frac{\hat{\beta}_0 - \beta}{S_e} \sqrt{\frac{n \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^n x_i^2}}} \sim t_{(n-2)}$$

$$t(\hat{\beta}_1) = \frac{\frac{\hat{\beta}_1 - \beta}{\sqrt{\text{Var}(\hat{\beta}_1)}}}{\sqrt{\frac{(n-2)S_e^2}{\sigma_e^2}}}{\frac{\hat{\beta}_1 - \beta}{S_e} \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}} \sim t_{(n-2)}$$

As hipóteses testadas são:

$$H_0 : \beta_0 = 0 \text{ vs. } H_1 : \beta_0 \neq 0$$

$$H_0 : \beta_1 = 1 \text{ vs. } H_1 : \beta_1 \neq 1$$

3.4.2 Regressão linear simples sem intercepto

A Regressão linear sem intercepto é um caso especial da regressão linear simples, nela o intercepto não está presente, com isto a reta de regressão passa obrigatoriamente na origem, o modelo estatístico é da seguinte forma:

$$Y_i = \beta_1 X_i + \varepsilon_i \quad (4)$$

Y : Variável resposta;

X : Variável independente;

β_1 : Coeficiente de regressão;

ε : Erro experimental.

As pressuposições do modelo são as mesmas de (3.4.1)

- O estimador do parâmetro é dado por: $\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i}{\sum_{i=1}^n x_i^2}$

Prova:

Como (3) se trata de um modelo linear de Gauss-Markov logo $Y \sim N(\beta x_i, \sigma^2)$

Assim $f(y|\beta) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{y_i - \beta x_i}{\sigma})^2}$ é a função de verossimilhança com score dado

por,

$$l(\beta|y_i) = \sigma^{-n} (2\pi)^{-\frac{n}{2}} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - \beta x_i}{\sigma} \right)^2.$$

Achando o ponto máximo da função de verossimilhança,

$$\frac{\partial l(\beta|y_i)}{\partial \beta} = \sum_{i=1}^n (x_i y_i - \hat{\beta} x_i^2) = 0 \Rightarrow \hat{\beta}_{MAV} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i}{\sum_{i=1}^n x_i^2}$$

- O teste t sobre os parâmetros da Regressão Linear sem intercepto assim é definido:

$$t = \frac{\hat{\beta}_1 - \beta}{S_e} \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}; \quad S_e^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n-2} \quad (5)$$

Prova: Utilizando algumas propriedades:

1. $\hat{\beta}_1 \sim N\left(\beta_1, \frac{\sigma_e^2}{\sum_{i=1}^n x_i^2}\right)$
2. $Z = \frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{\sqrt{\text{Var}(\hat{\beta}_1)}} \sim N(0, 1)$
3. $\frac{(n-1)S_e^2}{\sigma_e^2} \sim \chi_{(n-1)}^2$
4. $\frac{N(0, 1)}{\sqrt{\frac{\chi_n^2}{n}}} \sim t_n$

Então temos,

$$t = \frac{\frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{\sqrt{\text{Var}(\hat{\beta}_1)}}}{\sqrt{\frac{(n-1)S_e^2}{\sigma_e^2} \frac{1}{n-1}}} = \frac{\frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{\sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}}}{S_e} = \frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{S_e} \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2} \sim t_{n-1}$$

As hipóteses testadas são:

$$H_0 : \beta_1 = 1 \text{ vs. } H_1 : \beta_1 \neq 1$$

3.5 Gráfico de Bland-Altman

O gráfico de Bland-Altman foi criado como uma alternativa ao coeficiente de correlação já que este avalia apenas associação linear e não concordância que são coisas diferentes. De acordo com (Hirakata & Camey, 2009), o método avalia 4 itens: Viés, erro, Outliers e Tendência.

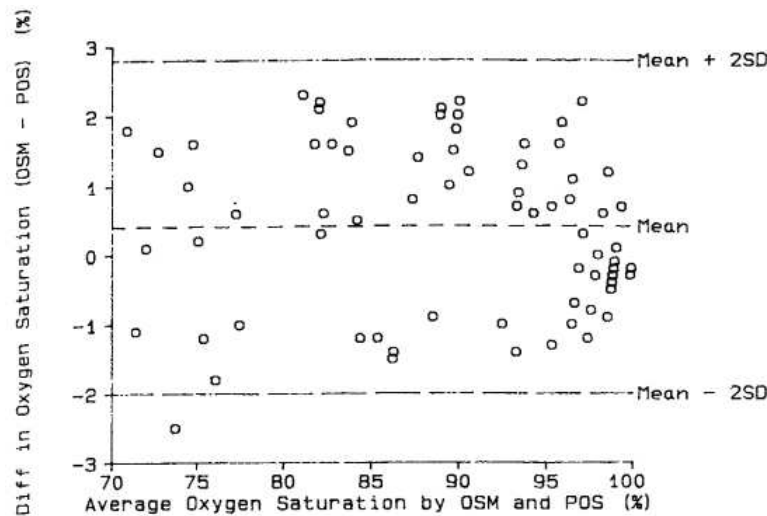
A aplicação do gráfico de Bland-Altman requer normalidade dos dados para a aplicação do teste t pareado, o que é um ponto negativo. A Análise consiste em construir um gráfico de dispersão das diferenças com as médias dos valores de X_i e Y_i , assim no eixo x são plotadas as médias $(X_i + Y_i)/2$ e no eixo y as diferenças $(D_i = X_i - Y_i)$.

Os limites superior e inferior são definidos:

$$\begin{cases} \text{LS} = \bar{X} + 2S_D \\ \text{LI} = \bar{X} - 2S_D \end{cases} ; \bar{X} = \frac{\sum_{i=1}^n D_i}{n} \text{ e } S_D^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (D_i - \bar{D})^2}{n - 1}$$

O gráfico de Bland & Altman fica da seguinte forma:

Figura 2: Gráfico de Bland Altman



Fonte: Bland & Altman(1986)

O gráfico anterior representa uma situação ideal onde os dados não apresentam tendência positiva ou negativa, a média está próxima de zero e a maioria dos dados estão dentro dos limites de concordância, quando satisfeitas essas condições os equipamentos são ditos concordantes.

3.6 Índices de concordância de Willmott

3.6.1 Índice de concordância de Willmott(1985)

O índice de concordância de Willmott foi criado na década de 80 para avaliar o grau de desempenho de dados observados e preditos, também pode ser utilizado para análise de concordância entre modelos.

O índice de Willmott é dado pela seguinte equação:

$$d = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - X_i)^2}{\sum_{i=1}^n (|Y_i - \bar{X}| + |X_i - \bar{X}|)^2}; \quad d \in [0, 1] \quad (6)$$

Quanto mais próximo de 1 mais concordante são as estimativas. Alguns trabalhos consideram nos lugar de O e P, X e Y que são as estimativas obtidas por dois métodos de medição.

3.6.2 Índice de concordância de Willmott modificado

O índice de Willmott modificado difere do índice original pela substituição dos termos quadráticos por termos absolutos. Com isso o novo índice se aproxima mais lentamente de 1 o que penaliza o índice original. O índice modificado é definido por (LEGATES & MCCABE JR, 1999):

$$d_{mod} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n |X_i - Y_i|}{\sum_{i=1}^n (|Y_i - \bar{X}| + |Y_i - \bar{Y}|)}; \quad d_{mod} \in [0, 1] \quad (7)$$

3.6.3 Índice de concordância de Willmott refinado (2012)

Este novo índice de concordância que apresenta uma melhoria não trivial em relação aos seus índices predecessores (Willmott *et al.*, 2012), porém é mais eficiente. O novo índice varia de -1 a 1 e é definido da seguinte forma:

$$d_{ref} = \begin{cases} 1 - \frac{\sum_{i=1}^n |X_i - Y_i|}{2 \sum_{i=1}^n |X_i - \bar{X}|}; & \text{quando } \sum_{i=1}^n |Y_i - X_i| \leq 2 \sum_{i=1}^n |X_i - \bar{X}| \\ \frac{2 \sum_{i=1}^n |X_i - \bar{X}|}{\sum_{i=1}^n |Y_i - X_i|} - 1; & \text{quando } \sum_{i=1}^n |Y_i - X_i| > 2 \sum_{i=1}^n |X_i - \bar{X}| \end{cases} \quad d_{ref} \in [-1, 1] \quad (8)$$

Quanto mais próximo de 1 mais concordante são os valores e mais próximo de -1 menos concordantes são.

3.7 Índices de erro

De acordo com Oliveira(2016) o índice de concordância deve ser complementado pelo erro quadrático médio(EQM) assim como os componentes sistemáticos e não sistemáticos. Os índices de erro tem a seguinte relação:

$$EQM = EQM_s + EQM_n$$

Onde:

EQM - Erro quadrático médio;

EQM_S - Erro quadrático médio sistemático;

EQM_N - Erro quadrático médio não sistemático.

Respectivamente temos:

$$\sum_{i=1}^n \frac{(Y_i - X_i)^2}{n} = \sum_{i=1}^n \frac{(\hat{Y}_i - X_i)^2}{n} + \sum_{i=1}^n \frac{(Y_i - \hat{Y}_i)^2}{n} \quad (9)$$

Prova:

Para demonstrar a relação é necessário as seguintes relações:

$$1. \hat{Y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_i$$

$$2. \hat{\beta}_0 = \bar{Y} - \hat{\beta}_1 \bar{X}$$

$$3. \hat{\beta}_1 = \frac{SP_{XY}}{SQD_X}$$

Expandindo o termo:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \frac{(Y_i - X_i)^2}{n} &= \sum_{i=1}^n \frac{(Y_i - \hat{Y}_i + \hat{Y}_i - X_i)^2}{n} \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{(Y_i - \hat{Y}_i)^2}{n} + \sum_{i=1}^n \frac{2(Y_i - \hat{Y}_i)(\hat{Y}_i - X_i)}{n} + \sum_{i=1}^n \frac{(\hat{Y}_i - X_i)^2}{n} \end{aligned}$$

Agora basta mostrarmos que,

$$\sum_{i=1}^n \frac{2(Y_i - \hat{Y}_i)(\hat{Y}_i - X_i)}{n} = 0$$

Expandindo o termo anterior,

$$\frac{2}{n} \left(\sum_{i=1}^n Y_i \hat{Y}_i - \sum_{i=1}^n X_i Y_i - \sum_{i=1}^n \hat{Y}_i^2 + \sum_{i=1}^n X_i \hat{Y}_i \right)$$

Utilizando 2 em 1 obtemos $\hat{Y} = \bar{Y} + \hat{\beta}_1(X_i - \bar{X})$ e aplicando no termo anterior

$$\begin{aligned} \bullet \sum_{i=1}^n Y_i \hat{Y}_i &= \sum_{i=1}^n Y_i [\bar{Y} + \hat{\beta}_1(X_i - \bar{X})] = \frac{(\sum_{i=1}^n Y_i)^2}{n} + \hat{\beta}_1 \left(\sum_{i=1}^n X_i Y_i - n \bar{X} \bar{Y} \right) = \frac{(\sum_{i=1}^n Y_i)^2}{n} + \hat{\beta}_1 \cdot SP_{XY} \\ \bullet \sum_{i=1}^n X_i \hat{Y}_i &= \sum_{i=1}^n X_i [\bar{Y} + \hat{\beta}_1(X_i - \bar{X})] = \frac{\sum_{i=1}^n X_i \sum_{i=1}^n Y_i}{n} + \hat{\beta}_1 \left[\sum_{i=1}^n X_i^2 - \frac{(\sum_{i=1}^n X_i)^2}{n} \right] = \frac{\sum_{i=1}^n X_i \sum_{i=1}^n Y_i}{n} + \hat{\beta}_1 \cdot SQD_X \\ \bullet \sum_{i=1}^n \hat{Y}_i^2 &= \sum_{i=1}^n [\bar{Y} + \hat{\beta}_1(X_i - \bar{X})]^2 = n\bar{Y}^2 + 2\bar{Y}\hat{\beta}_1 \underbrace{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})}_0 + \hat{\beta}_1^2 \underbrace{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}_{SQD_X} = \frac{(\sum_{i=1}^n Y_i)^2}{n} + \hat{\beta}_1^2 \cdot SQD_X. \end{aligned}$$

Assim temos,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \frac{2(Y_i - \hat{Y}_i)(\hat{Y}_i - X_i)}{n} &= \frac{2}{n} \left[\frac{(\sum_{i=1}^n Y_i)^2}{n} + \hat{\beta}_1 \cdot SP_{XY} - \sum_{i=1}^n X_i Y_i - \frac{(\sum_{i=1}^n Y_i)^2}{n} - \hat{\beta}_1^2 \cdot SQD_X + \frac{\sum_{i=1}^n X_i \sum_{i=1}^n Y_i}{n} + \hat{\beta}_1 \cdot SQD_X \right] = 0 \end{aligned}$$

Em uma situação ideal o EQM_s deve ser próximo de zero e EQM_n deve ser próximo do EQM.

3.8 Índices de Desempenho

3.8.1 Índice de desempenho de Camargo & Sentelhas (1997)

Camargo et. al (1997) propuseram um novo índice denominado índice de desempenho que reúne o Coeficiente de correlação de Pearson(ρ), denominado também por índice de precisão, e o índice de Willmott(d) denominado também de índice de desempenho. O novo índice denominado índice de desempenho(c) é definido pelo produto do coeficiente de correlação de Pearson e do índice de Willmott.

$$c = \rho \cdot d; \quad c \in [0, 1] \quad (10)$$

A tabela 1 fornece os valores de desempenho do método.

Tabela 1: Tabela de Desempenho de Camargo & Sentelhas

Valor de c	Desempenho
>0,85	Ótimo
0,75 † 0,85	Muito Bom
0,65 † 0,75	Bom
0,60 † 0,65	Mediano
0,50 † 0,60	Sofrível
0,40 † 0,50	Mau
$\leq 0,40$	Péssimo

Fonte: Camargo & Sentelhas, 1997

3.8.2 Índice de desempenho de Alvares *et al.*(2013)

O novo índice proposto por Alvares et al. (2013) é uma atualização do índice de desempenho proposto por Camargo e Centelhas, o índice de concordância de Willmott(d) é substituído pelo índice de Willmott refinado(d_r). O novo índice é dado por:

$$P_i = r \cdot d_r; \quad P_i \in [-1, 1] \quad (11)$$

A tabela 2 fornece os valores de desempenho do método.

Tabela 2: Tabela de Desempenho de Alvares et al.

Valor de c	Desempenho
$\geq 0,75$	Ótimo
$0,60 \vdash 0,75$	Muito Bom
$0,45 \vdash 0,60$	Bom
$0,30 \vdash 0,45$	Mediano ou Tolerável
$0,15 \vdash 0,30$	Sofrível ou Pobre
$0,00 \vdash 0,15$	Mau
$< 0,00$	Péssimo

Fonte: Alvares et al., 1997

3.9 Coeficiente de correlação e concordância(CCC)

O método proposto por Lin tem como objetivo avaliar a concordância entre dois métodos distintos, ou seja, validar medidas de novos instrumentos, comparando estas novas medidas com outras geradas por métodos já consagrados (goldstandards), mas que poderia ser utilizado para a verificação da concordância entre dois pares de medidas (FILHO *et al.*, 2005).

O índice é dado por(LIN, 1989):

$$\hat{\rho}_c = \frac{2S_{YX}}{S_Y^2 + S_X^2 + (\bar{Y} - \bar{X})^2} \quad (12)$$

Prova:

O grau de concordância é obtido pela esperança do quadrado da diferença de duas medidas,

$$E(Y - X)^2 = \underbrace{E(Y^2)}_{\sigma_y^2 + \mu_y^2} - 2 \cdot \underbrace{E(XY)}_{\rho\sigma_x\sigma_y + \mu_x\mu_y} + \underbrace{[E(X)]^2}_{\sigma_x^2 + \mu_x^2} = (\mu_y - \mu_x)^2 + \sigma_y^2 + \sigma_x^2 - 2\rho\sigma_y\sigma_x$$

Para criar um índice de -1 a 1 faz-se,

$$\rho_c = 1 - \frac{E(Y - X)^2}{E[(Y - X)|\rho = 0]}$$

$$\rho_c = 1 - \frac{\sigma_y^2 + \sigma_x^2 + (\mu_y - \mu_x)^2 - 2\rho\sigma_y\sigma_x}{\sigma_y^2 + \sigma_x^2 + (\mu_y - \mu_x)^2} = \frac{2\rho\sigma_y\sigma_x}{\sigma_y^2 + \sigma_x^2 + (\mu_y - \mu_x)^2}$$

Obtem-se um coeficiente de concordância,

$$\rho_c = \frac{2\rho\sigma_y\sigma_x}{(\mu_x - \mu_y)^2 + \sigma_y^2 + \sigma_x^2}$$

Cujo estimador:

$$\hat{\rho}_c = \frac{2S_{YX}}{(\bar{Y} - \bar{X})^2 + S_Y^2 + S_X^2}$$

Quanto mais próximo de 1, mais concordantes são os valores e quanto mais próximo de -1 menos concordantes.

3.10 Índices de Nash Sutcliffe

3.10.1 Índice de Eficiência de Nash-Sutcliffe

O método de Nash-Sutcliffe avalia o poder preditivo de modelos hidrológicos mas pode ser usado tanto para calibração como método de concordância entre dois modelos, assim como método de Willmott: O coeficiente originalmente avalia o poder preditivo de modelos avaliando a concordância entre valores observados e preditos, em estudos de concordância os valores Preditos e Observados são substituídos por estimativas de dois métodos diferentes. O Coeficiente é dado por:

$$NS = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - Y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}; \quad NS \in [-\infty, 1] \quad (13)$$

Quanto mais próximo de 1, mais concordantes são os valores X e Y.

3.10.2 Índice de Eficiência de Nash-Sutcliffe modificado

Assim como o índice de Willmott modificado, o índice de Nash-Sutcliffe modificado substitui a soma de quadrados pela soma absoluta, o objetivo é penalizar os valores extremos que o índice pode assumir (KRAUSE *et al.*, 2005).

O índice é dado por:

$$NS_{mod} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n |X_i - Y_i|}{\sum_{i=1}^n |X_i - \bar{X}|}; \quad NS_{mod} \in [-\infty, 1] \quad (14)$$

3.11 Regressão não Linear

Na análise de regressão, os modelos de regressão não linear são definidos quando pelo menos uma das derivadas parciais do modelo em relação ao um parâmetro depende de outro parâmetro, dependendo do modelo adotado, técnicas de linearização podem ser adotadas.

O modelo de regressão não linear é expresso por (SOUZA, 1998):

$$y_t = f(x_t, \theta^o) + \epsilon_t \quad (15)$$

Onde:

y_k = Vetor de observações k-dimensional;

$\theta^o \in \Theta$ = Parâmetro p-dimensional;

ϵ_t = Erro experimental.

No modelo linear de Gauss-Markov há separação da matriz de delineamento e do vetor de Parâmetros (LUNA & OLINDA, 2014), já em uma regressão não linear isto não é possível, ao passo que utilizando o método dos mínimos quadrados é necessário algoritmos iterativos como o de Gauss-Newton para se obter os valores dos parâmetros que estão na forma de sistemas de equações não lineares (MAZUCHELI & ACHCAR, 2002):

$$y = X\beta + e \quad (\text{Modelo Linear de Gauss-Markov})$$

$$y = f(x, \theta) + e \quad (\text{Modelo não Linear})$$

Utilizando-se do método de mínimos para estimar os parâmetros:

$$SSE(\theta) = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i, \theta)]^2$$

$$\frac{\partial SSE(\theta)}{\partial \theta_1} = -2 \sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i, \theta)] \frac{\partial f(x_i, \theta)}{\partial \theta_1} = 0$$

$$\frac{\partial SSE(\theta)}{\partial \theta_2} = -2 \sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i, \theta)] \frac{\partial f(x_i, \theta)}{\partial \theta_2} = 0$$

⋮

$$\frac{\partial SSE(\theta)}{\partial \theta_p} = -2 \sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i, \theta)] \frac{\partial f(x_i, \theta)}{\partial \theta_p} = 0$$

Obtem-se o seguinte sistema de equações não lineares:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_i, \theta)}{\partial \theta_1} [y_i - f(x_i, \hat{\theta})] = 0 \\ \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_i, \theta)}{\partial \theta_2} [y_i - f(x_i, \hat{\theta})] = 0 \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_i, \theta)}{\partial \theta_p} [y_i - f(x_i, \hat{\theta})] = 0 \end{cases}$$

Que pode ser reescrito na seguinte forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \left. \frac{\partial f(x_1, \theta)}{\partial \theta_1} \right|_{\theta=\hat{\theta}} & \left. \frac{\partial f(x_2, \theta)}{\partial \theta_1} \right|_{\theta=\hat{\theta}} & \cdots & \left. \frac{\partial f(x_n, \theta)}{\partial \theta_1} \right|_{\theta=\hat{\theta}} \\ \left. \frac{\partial f(x_1, \theta)}{\partial \theta_2} \right|_{\theta=\hat{\theta}} & \left. \frac{\partial f(x_2, \theta)}{\partial \theta_2} \right|_{\theta=\hat{\theta}} & \cdots & \left. \frac{\partial f(x_n, \theta)}{\partial \theta_2} \right|_{\theta=\hat{\theta}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left. \frac{\partial f(x_1, \theta)}{\partial \theta_p} \right|_{\theta=\hat{\theta}} & \left. \frac{\partial f(x_2, \theta)}{\partial \theta_p} \right|_{\theta=\hat{\theta}} & \cdots & \left. \frac{\partial f(x_n, \theta)}{\partial \theta_p} \right|_{\theta=\hat{\theta}} \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} f(x_1, \hat{\theta}) \\ f(x_2, \hat{\theta}) \\ \vdots \\ f(x_n, \hat{\theta}) \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Este sistema é o equivalente a $J'_f(\hat{\theta})[y - f(\hat{\theta})] = 0$. Onde $J_f(\hat{\theta})$ é a matriz Jacobiano.

3.11.1 Método de Newton

O método de Newton também chamado de algoritmo de Gauss-Newton pode ser usado para fornecer soluções de sistemas de equações não lineares através de um algoritmo iterativo, no pacote MVTNORM do Software R usando a função *nls* o algoritmo de Gauss-Newton é usado por *default* por ser computacionalmente menos dispendioso, vários algoritmos podem também ser utilizados como o algoritmo de Levenberg-Marquardt e Newton-Raphson generalizado.

Por se tratar de um algoritmo iterativo é necessário bons valores iniciais para convergência do método, chutes ruins podem resultar em convergência para mínimos locais, múltiplos passos até a convergência ou então nem sequer convergir, dos vários métodos para encontrar bons valores iniciais será utilizado neste trabalho o método da análise gráfica que consiste em aproximar graficamente a curva dos pontos.

O método de Newton é dado pela seguinte relação (MATTOS, 2013):

$$\theta^{(a+1)} = \theta^{(a)} + [J_f^{(a)} J_f^a]^{-1} J_f^{(a)} r(\theta^{(a)}) \quad (16)$$

Prova: Utilizando se dos seguintes fatos:

1. $e = r(\theta) = y - f(x, \theta)$
2. $SSE(\theta) = r'(\theta)r(\theta)$

$$3. f(x, \theta) \approx f(x, \theta^a) + J(\theta^a)(\theta - \theta^a)$$

Rescrevendo $e = r(\theta)$ e $\Delta\theta^a = \theta - \theta^a$. Aplicando (3) em (1):

$$r(\theta) \approx y - f(x, \theta^a) - J(\theta^a)(\theta - \theta^a) = r(\theta^a) - J(\theta^a)(\theta - \theta^a)$$

Aplicando esta nova relação em (2):

$$\begin{aligned} SSE(\theta) &\approx [r(\theta^a) - J(\theta^a)\Delta\theta^a]'[r(\theta^a) - J(\theta^a)\Delta\theta^a] \\ &\approx [r'(\theta^a) - \Delta\theta'^a J'(\theta^a)]'[r(\theta^a) - J(\theta^a)\Delta\theta^a] \\ &\approx r'(\theta^a)r(\theta^a) - \underbrace{r'(\theta^a)J(\theta^a)\Delta\theta^a - \Delta\theta'^a J'(\theta^a)r(\theta^a)}_{-2\Delta\theta'^a J'(\theta^a)r(\theta^a)} + \Delta\theta'^a J'(\theta^a)J(\theta^a)\Delta\theta^a \end{aligned}$$

Minimizando $SSE(\theta)$ em relação a $\Delta\theta^a$,

$$\frac{\partial SSE(\theta)}{\partial \Delta\theta^a} = -2[J'(\hat{\theta}^a)J(\hat{\theta}^a)\Delta\hat{\theta}^a - J'(\hat{\theta}^a)r(\hat{\theta}^a)] = 0$$

$$\Rightarrow \underbrace{\Delta\hat{\theta}^a}_{\hat{\theta} - \hat{\theta}^a} = [J'(\hat{\theta}^a)J(\hat{\theta}^a)]^{-1} J'(\hat{\theta}^a)r(\hat{\theta}^a)$$

Assim obtemos a fórmula iterativa:

$$\theta^{(a+1)} = \theta^{(a)} + [J'(\hat{\theta}^{(a)})J(\hat{\theta}^{(a)})]^{-1} J'(\hat{\theta}^{(a)})r(\hat{\theta}^{(a)})$$

Que pode ser simplificada para fórmula 16.

3.11.2 Modelo Logístico

O modelo de crescimento logístico já era conhecido desde o século XIX e sua função foi derivada de um problema de EDO (Equação diferenciais ordinárias) em que o crescimento da população é proporcional ao tamanho da população com uma restrição na capacidade de suporte da população (STEWART, 2016).

O modelo é da seguinte forma:

$$y_i = \frac{\beta_1}{1 + \beta_2 \cdot e^{-\beta_3 \cdot x_i}} + \varepsilon_i \quad (17)$$

Demonstração:

Dada a equação Diferencial Logística que representa a taxa de crescimento de uma população (P) proporcional (k) ao tamanho da própria população, porém restringida pela capacidade de suporte (M) :

$$\frac{dP}{dt} = kP \left(1 - \frac{P}{M} \right)$$

Como se trata de uma equação separável de primeira ordem:

$$\int \frac{dP}{P(1 - \frac{P}{M})} = \int k dt$$

Basta resolver a integral e isolar P:

- $\int \frac{dP}{P(1 - \frac{P}{M})} = \int \frac{M}{P(M - P)} dP = \int \left(\frac{1}{P} + \frac{1}{M - P} \right) dP = \ln|P| - \ln|M - P| + c_1$
- $\int k dt = kt + c_2$

Igualando e considerando $C = c_1 - c_2$:

$$\ln \left| \frac{M - P}{P} \right| = -kt - C \Rightarrow \left| \frac{M - P}{P} \right| = e^{-kt - C} = e^{-C} e^{-kt}$$

Considerando $A = \pm e^{-C}$

$$\frac{M}{P} - 1 = Ae^{-kt} \Rightarrow \frac{P}{M} = \frac{1}{1 + Ae^{-kt}} \Rightarrow P(t) = \frac{M}{1 + Ae^{-kt}}$$

Reescrevendo $P(t)=y$, $M = \beta_1$, $A = \beta_2$, $k = \beta_3$ e $t = x$ finalmente obtemos o modelo da equação 17.

3.11.3 Modelo de Gompertz

O modelo de Gompertz apresenta um comportamento sigmoideal e é utilizado para modelar crescimento bovino e matéria seca de plantas, o modelo utilizado possui 3 parâmetros e é da seguinte forma (DOMINGUES, 2011):

$$Y_i = \beta_1 e^{-\beta_2 e^{-\beta_3 x_i}} + \varepsilon_i \quad (18)$$

Demonstração:

Dada a equação Diferencial que representa a taxa de crescimento de uma população(P) proporcional(r) ao tamanho da própria população com uma restrição de crescimento(k):

$$\frac{dN}{dt} = rN \ln \left(\frac{k}{N} \right)$$

Reorganizando e aplicando a integral em ambos os lados:

$$\frac{dN}{N \ln(\frac{k}{N})} = r dt \Rightarrow \int \frac{dN}{N \ln(\frac{k}{N})} = \int r dt$$

Agora basta resolver as integrais e isolar N

- Para resolver $\int \frac{dN}{N \ln\left(\frac{k}{N}\right)}$, façamos $U = \ln\left(\frac{k}{N}\right) \Rightarrow dU = -\frac{dN}{N}$

$$\int \frac{dN}{N \ln\left(\frac{k}{N}\right)} = - \int \frac{dU}{U} = -\ln|U| = -\ln\left|\ln\left(\frac{k}{N}\right)\right| + c_1$$
- $\int r dt = rt + c_2$

Considerando $C = c_2 - c_1$ e $A = \pm e^{-C}$

$$\ln\left(\ln\left|\frac{k}{N}\right|\right) = -rt - C \Rightarrow \left|\ln\left(\frac{k}{N}\right)\right| = e^{-rt} e^{-C} \Rightarrow \ln\left(\frac{k}{N}\right) = A e^{-rt}$$

$$\Rightarrow \frac{k}{N} = e^{A e^{-rt}} \Rightarrow N = \frac{k}{e^{A e^{-rt}}} \Rightarrow N(t) = k e^{-A e^{-rt}}$$

Reescrevendo $N(t) = y$, $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = A$, $\beta_3 = r$ e $t=x$ obtemos o modelo estatístico

3.12 Distribuição Normal Multivariada

Para o estudo de simulação é necessário simular os dados de uma distribuição normal bivariada pois simular os valores de x e y separadamente não garante uma alta correlação de dados. De acordo com (FERREIRA, 2008) a densidade da distribuição normal multivariada é dada por:

$$f(x|\mu_x, \sigma_x) = (2\pi)^{-p/2} |\Sigma|^{-1/2} e^{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T \Sigma^{-1} (x-\mu)} \quad (19)$$

$$\text{onde } \Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1p} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \cdots & \sigma_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{p1} & \sigma_{p2} & \cdots & \sigma_{pp} \end{bmatrix} \text{ e } \mu = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_p \end{bmatrix}$$

Pode-se utilizar o coeficiente de Pearson para reescrever a matriz de Variância e Covariância, considerando o caso bivariado temos a nova matriz,

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 \\ \rho\sigma_2\sigma_1 & \sigma_2^2 \end{bmatrix}; \quad \rho = \frac{\sigma_{ij}}{\sigma_i\sigma_j}$$

Desta forma é possível simular dados altamente correlacionados usando o coeficiente de Pearson.

4 Estudo por simulação

O estudo por simulação de alguns índices foi realizado através do Software R (R DEVELOPMENT CORE TEAM, 2018) versão 3.6.1. Para estudar o comportamento de todos os índices de acordo com a variação da correlação dos dados, foram considerados três casos sendo eles;

- Willmott original vs. Willmott modificado vs. Willmott refinado;
- Nash-Sutcliffe original vs. Nash-Sutcliffe modificado;
- Camargo & Sentelhas vs. Alvares et al.

No trabalho de Pereira et al.(2018) o índice de Willmott é comparado graficamente com suas variações via simulação conforme a variação do erro e repetições , neste trabalho a simulação foi feita considerando um número fixo de repetições, variando apenas o tamanho de (x, y) e o coeficiente de Pearson.

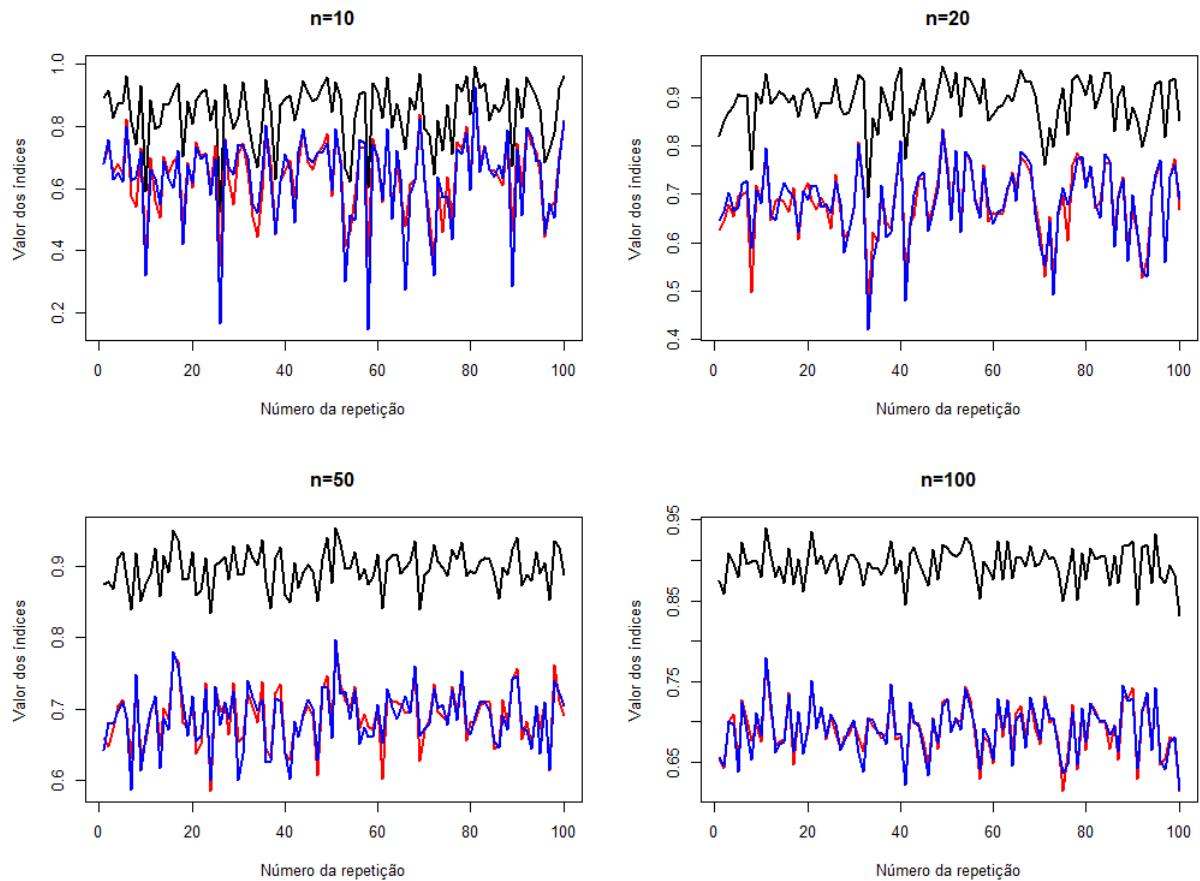
Os valores de X e Y foram simulados de uma distribuição normal bivariada, considerando uma correlação de 3/16 e 13/16 o que significa, respectivamente, uma correlação ruim e uma correlação boa sendo simulados com a mesma média e variância. Isto significa que uma boa correlação neste caso implica em uma boa concordância. Ademais, foi considerado quatro tamanhos de pares (x, y) sendo 10, 20, 50 e 100 e cada $I(x,y)$ repetido fixamente 100 vezes, sendo $I(x,y)$ um índice qualquer de x e y.

Os resultados da simulação vão ser analisados graficamente e acompanhados de uma tabela de medidas descritivas para auxiliar a análise gráfica, as medidas serão: média, variância, intervalo dado por $[\bar{X} - S_X, \bar{X} + S_X]$ e Frequência Relativa em porcentagem dos valores dentro dos intervalos.

4.0.1 Cenário 1 - Willmott(d) vs. Willmott modificado(d_{mod}) vs. Willmott refinado(d_{ref})

1. Considerando $\Sigma = \begin{pmatrix} 16 & 13 \\ 13 & 16 \end{pmatrix}$ e $\mu = \begin{bmatrix} 40 \\ 40 \end{bmatrix}$

Figura 3: Resultados Gráficos dos índices de Willmott(linha preta) vs. Willmott modificado(linha azul) vs. Willmott refinado(linha vermelha) considerando $\rho = 13/16$



Fonte: O autor

Tabela 3: Medidas descritivas dos valores de d para $\rho = 13/16$

Amostra	n=10	n=20	n=50	n=100
Média	0.87	0.88	0.90	0.89
Variância	0.10	0.05	0.02	0.02
intervalo	[0.76 , 0.97]	[0.82, 0.96]	[0.87, 0.92]	[0.87, 0.91]
FR(%)	93	77	69	69

Fonte: O autor

Tabela 4: Medidas descritivas dos valores de d_{mod} para $\rho = 13/16$

Amostra	n=10	n=20	n=50	n=100
Média	0.67	0.67	0.69	0.69
Variância	0.10	0.07	0.04	0.03
intervalo	[0.56 , 0.77]	[0.60, 0.75]	[0.64, 0.73]	[0.66, 0.72]
FR(%)	69	70	68	73

Fonte: O autor

Tabela 5: Medidas descritivas dos Valores de d_{ref} para $\rho = 13/16$

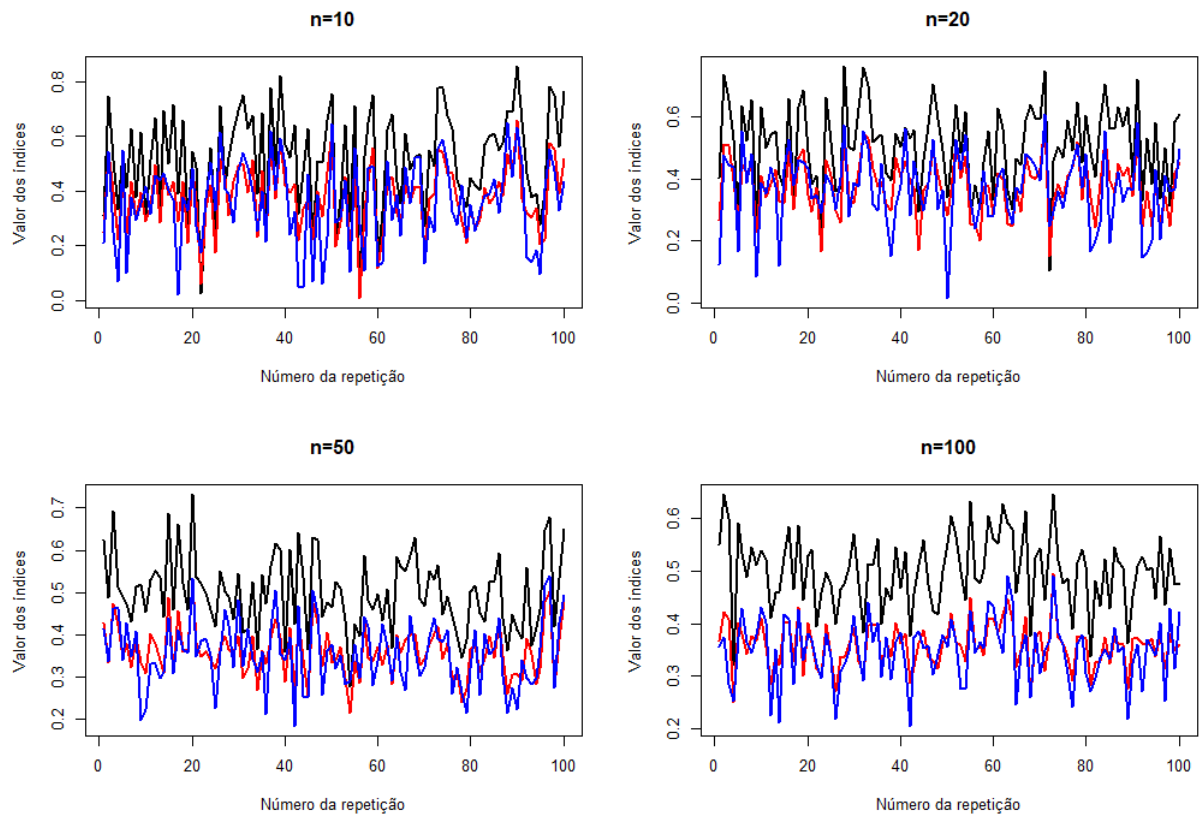
Amostra	n=10	n=20	n=50	n=100
Média	0.66	0.68	0.68	0.69
Variância	0.13	0.06	0.04	0.03
intervalo	[0.52, 0.79]	[0.62, 0.75]	[0.63, 0.73]	[0.65, 0.72]
FR(%)	74	73	67	63

Fonte: O autor

Graficamente, verificou-se que o índice de Willmott(d) apresentou sempre os maiores valores em relação aos índices de Willmott modificado(d_{mod}) e refinado(d_{ref}). Esperava-se esse resultado, pois estes foram criados para penalizar o índice original. Em todos os gráficos, estes dois índices revelaram forte coincidência demonstrando que tanto faz usar um ou outro. Isso por sua vez corrobora com as Tabelas 3, 4 e 5. À medida que o tamanho da amostra aumenta fica mais fácil ver os distanciamentos de d com d_{mod} e d_{ref} .

2. Considerando $\Sigma = \begin{pmatrix} 16 & 3 \\ 3 & 16 \end{pmatrix}$, $\mu = \begin{bmatrix} 40 \\ 40 \end{bmatrix}$ e $n=100$

Figura 4: Resultados Gráficos dos índices de Willmott original (linha preta) vs. Willmott modificado (linha azul) vs. Willmott refinado (linha vermelha) considerando $\rho = 3/16$



Fonte: O autor

Tabela 6: Medidas descritivas dos Valores de d para $\rho = 3/16$

Amostra	n=10	n=20	n=50	n=100
Média	0.50	0.48	0.49	0.50
Variância	0.17	0.13	0.08	0.06
intervalo	[0.33, 0.68]	[0.34, 0.61]	[0.40, 0.58]	[0.44, 0.57]
FR(%)	62	65	64	67

Fonte: O autor

Tabela 7: Medidas descritivas dos Valores de d_{mod} para $\rho = 3/16$

Amostra	n=10	n=20	n=50	n=100
Média	0.37	0.35	0.35	0.36
Variância	0.12	0.09	0.06	0.04
intervalo	[0.24, 0.49]	[0.26, 0.44]	[0.29, 0.42]	[0.32, 0.40]
FR(%)	66	66	68	71

Fonte: O autor

Tabela 8: Medidas descritivas dos Valores de d_{ref} para $\rho = 3/16$

Amostra	n=10	n=20	n=50	n=100
Média	0.33	0.33	0.35	0.35
Variância	0.16	0.11	0.08	0.05
intervalo	[0.16, 0.50]	[0.22, 0.44]	[0.27, 0.43]	[0.30, 0.41]
FR(%)	68	59	70	71

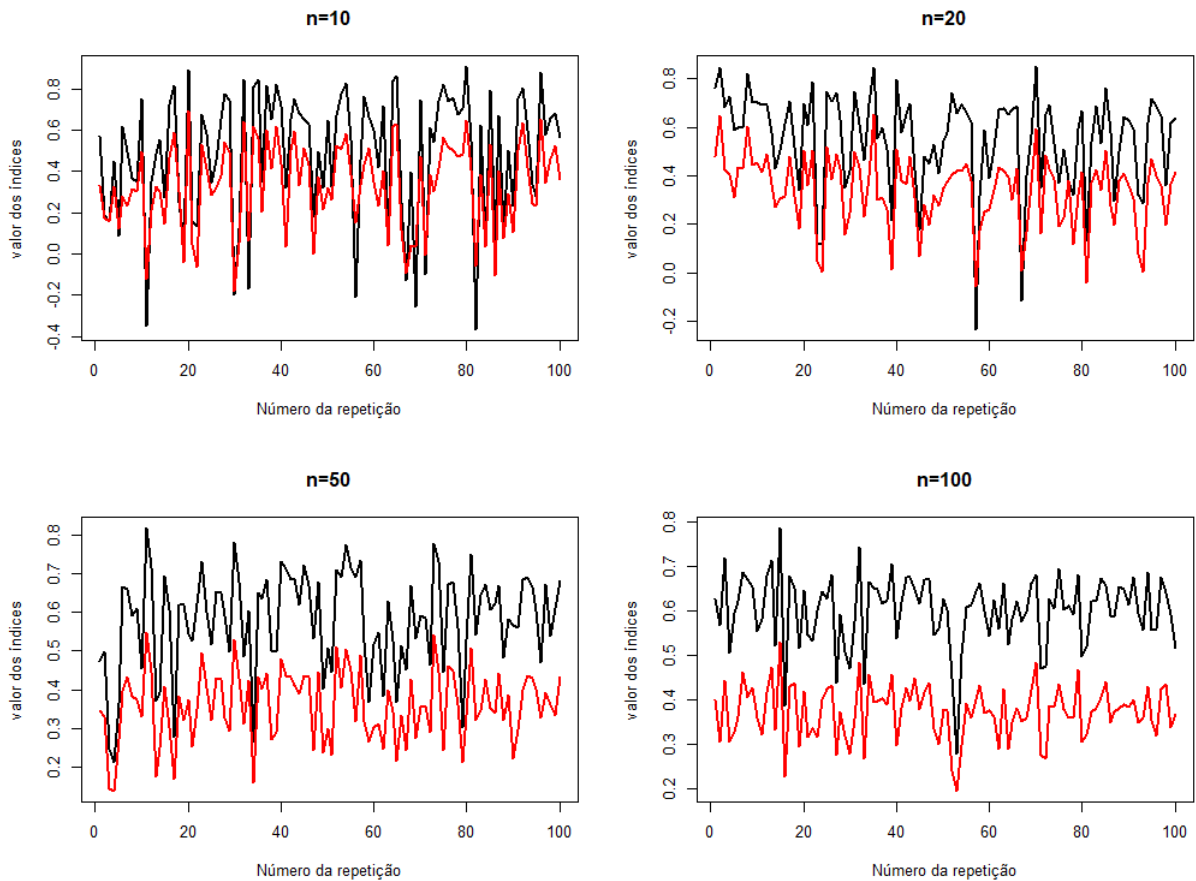
Fonte: O autor

Na Figura 7, como nas Tabelas 9 e 10, houve um decaimento da média de todos os índices, o recurso gráfico ficou comprometido porém, para $n=50$ é visível que o índice original ainda supera os demais índices, e estes ainda apresentam uma forte coincidência. A conclusão da simulação do cenário 1 é que os índices refinado e modificado podem substituir um ao outro para alta ou baixa concordância.

4.0.2 Cenário 2 - Nash-Sutcliffe vs. Nash-Sutcliffe Modificado

1. Considerando $\Sigma = \begin{pmatrix} 16 & 13 \\ 13 & 16 \end{pmatrix}$ e $\mu = \begin{bmatrix} 40 \\ 40 \end{bmatrix}$

Figura 5: Resultados gráficos para os índices de Nash-Sutcliffe(linha preta) vs. Nash-Sutcliffe modificado(linha vermelha) considerando $p = 13/16$



Fonte: O autor

Tabela 9: Medidas descritivas dos Valores de NS para $\rho = 13/16$

Amostra	n=10	n=20	n=50	n=100
Média	0.49	0.55	0.57	0.61
Variância	0.36	0.21	0.11	0.07
intervalo	[0.13 , 0.86]	[0.34, 0.77]	[0.45, 0.69]	[0.53, 0.69]
FR(%)	76	76	65	67

Fonte: O autor

Tabela 10: Medidas descritivas dos Valores de NS_{mod} para $\rho = 13/16$

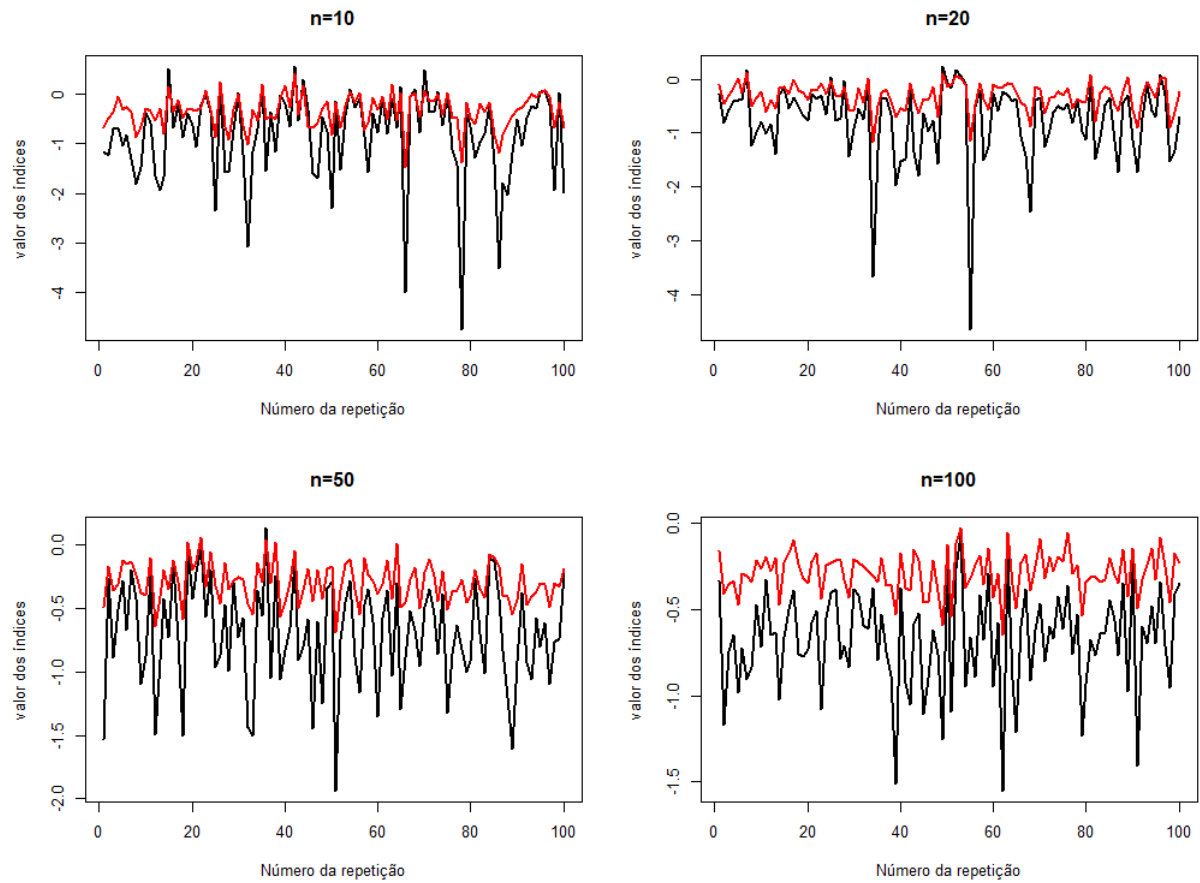
Amostra	n=10	n=20	n=50	n=100
Média	0.32	0.34	0.34	0.37
Variância	0.26	0.15	0.09	0.06
intervalo	[0.05 , 0.58]	[0.18, 0.50]	[0.25, 0.44]	[0.31, 0.44]
FR(%)	65	72	62	69

Fonte: O autor

Na Figura 5, como nas Tabelas 9 e 10, apesar de ambos apresentarem médias inferiores as médias dos índices de Willmott, a interpretação favorável ou não para concordância depende da área do problema, graficamente o índice original supera o índice modificado o que já era esperado pelas propriedades matemática dos índices.

2. Considerando $\Sigma = \begin{pmatrix} 16 & 3 \\ 3 & 16 \end{pmatrix}$ e $\mu = \begin{bmatrix} 40 \\ 40 \end{bmatrix}$

Figura 6: Resultados gráficos para os índices de Nash-Sutcliffe(linha preta) vs. Nash-Sutcliffe modificado(linha vermelha) considerando $\rho = 3/16$



Fonte: O autor

Tabela 11: Medidas descritivas dos Valores de NS para $\rho = 3/16$

Amostra	n=10	n=20	n=50	n=100
Média	-0.83	-0.76	-0.70	-0.68
Variância	0.91	0.72	0.41	0.28
intervalo	[-1.75 , 0.07]	[-1.49, 0]	[-1.11, -0.29]	[-0.96,-0.39]
FR(%)	79	82	68	68

Fonte: O autor

Tabela 12: Medidas descritivas dos Valores de NS_{mod} para $\rho = 3/16$

Amostra	n=10	n=20	n=50	n=100
Média	-0.34	-0.31	-0.29	-0.28
Variância	0.34	0.25	0.16	0.11
intervalo	[-0.68 , 0]	[-0.57, 0]	[-0.45, -0.13]	[-0.39,-0.17]
FR(%)	71	73	66	67

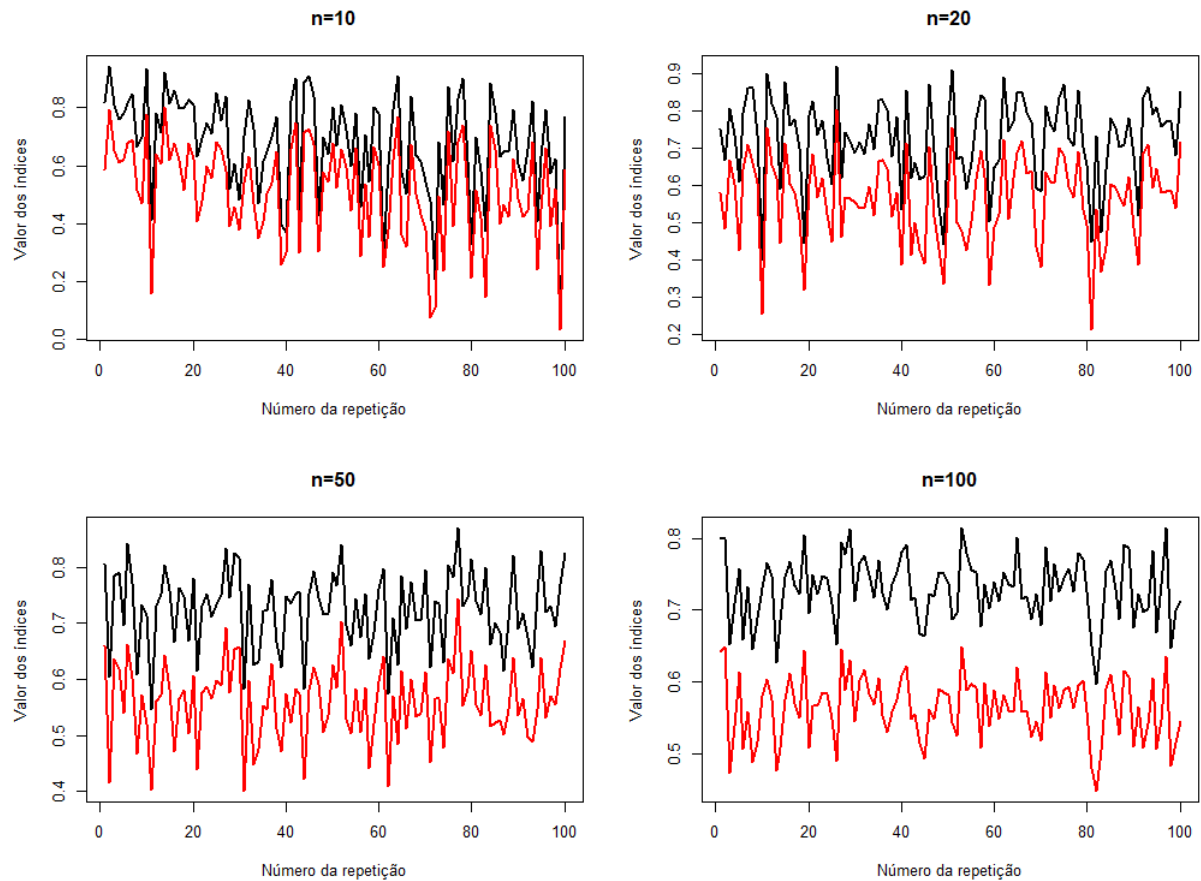
Fonte: O autor

Na figura 6 e nas tabelas 11 e 12 verifica-se que o índice de Nash-Sutcliffe original apresentou valores muito extremos, a variabilidade de ambos são as mais altas de todos os cenários, as médias ficaram negativas com nenhum dos índices chegando a valores aceitáveis. A conclusão da simulação do cenário 1 é que o índice modificado é o mais adequado por ter tendências menos extremas e conseqüentemente mais confiável.

4.0.3 Cenário 3 - Índice de desempenho de Camargo & Sentelhas e Alvarez et al.

1. Considerando $\Sigma = \begin{pmatrix} 16 & 13 \\ 13 & 16 \end{pmatrix}$ e $\mu = \begin{bmatrix} 40 \\ 40 \end{bmatrix}$

Figura 7: Resultados gráficos dos índices de Camargo & Sentelhas (linha preta) e Alvarez et al. (linha vermelha) para $\rho = 13/16$



Fonte: O autor

Tabela 13: Classificação percentual dos valores de desempenho de Camargo & Sentelhas para $\rho = 13/16$

Desempenho	n = 10	n = 20	n = 50	n = 100
Ótimo	12	10	1	0
Muito Bom	25	36	38	34
Bom	41	28	45	62
Mediano	12	9	12	3
Sufrível	7	10	4	1
Mau	3	4	0	0
Péssimo	0	3	0	0

Fonte: O autor

Tabela 14: Classificação percentual dos valores de desempenho de Alvares et al. para $\rho = 13/16$

Desempenho	n = 10	n = 20	n = 50	n = 100
Ótimo	3	1	0	0
Muito Bom	30	40	26	22
Bom	51	40	66	77
Mediano ou tolerável	15	15	8	1
Sofrível ou pobre	1	4	0	0
Mau	0	0	0	0
Péssimo	0	0	0	0

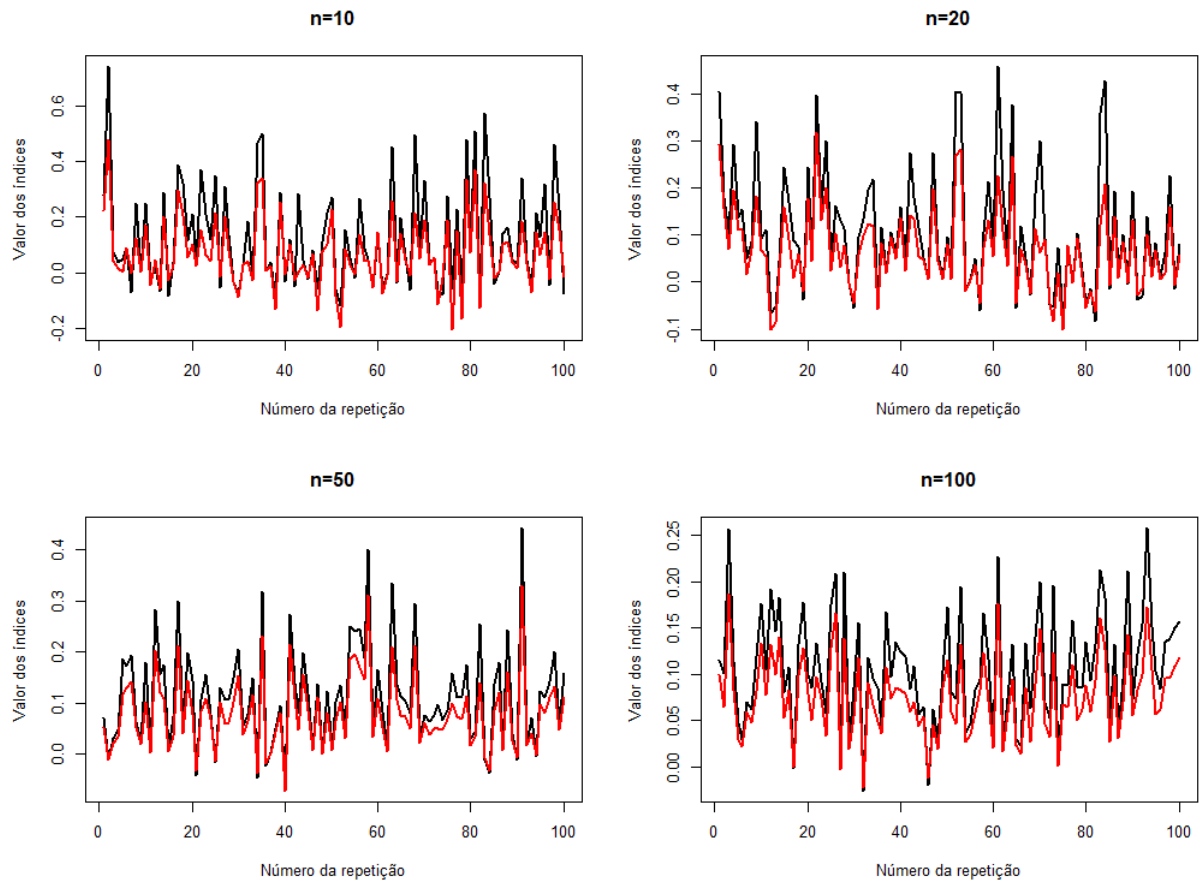
Fonte: O autor

Percebe -se na Figura 7 que a diferença entre ambos os índices aumenta conforme a amostra aumenta. Entretanto, apesar da diferença gráfica o critério de interpretação é diferente para ambos os índices, por exemplo, no gráfico de Pi valores de 0,45 a 0,60 são considerados bons, e considerando este intervalo no gráfico de c os valores são considerados mau ou sofrível.

Nota-se que nas Tabelas 13 e 14, apesar de existir diferenças gráfica entre c e Pi , verifica-se que os dois métodos apresentam resultados semelhantes de desempenho. Os índices de Pi apresentam uma pequena penalização, pois este classificou 77% dos dados como bom e 22% dos dados como muito bom, enquanto que os resultados c de Camargo & Sentelhas classificou 62% dos dados como bom e 34% como muito bom.

2. Considerando $\Sigma = \begin{pmatrix} 16 & 3 \\ 3 & 16 \end{pmatrix}$ e $\mu = \begin{bmatrix} 40 \\ 40 \end{bmatrix}$

Figura 8: Resultados gráficos dos índices de Camargo & Sentelhas e Alvares et al. para $\rho = 3/16$



Fonte: O autor

Tabela 15: Classificação percentual dos valores de desempenho de Camargo & Sentelhas para $\rho = 3/16$

Desempenho	n=10	n=20	n=50	n=100
Ótimo	0	0	0	0
Muito Bom	0	0	0	0
Bom	1	0	0	0
Mediano	0	0	0	0
Sofrível	3	0	0	0
Mau	5	5	1	0
Péssimo	91	95	99	100

Fonte: O autor

Tabela 16: Classificação percentual dos valores de desempenho de Alvares et al. para $\rho = 3/16$

Desempenho	n=10	n=20	n=50	n=100
Ótimo	0	0	0	0
Muito Bom	0	0	0	0
Bom	1	0	0	0
Mediano ou tolerável	5	1	2	0
Sofrível ou pobre	17	14	12	5
Mau	47	63	76	91
Péssimo	30	22	10	4

Fonte: O autor

Graficamente a maioria dos valores de c da Figura 8 são maiores que P_i , entretanto os valores de ambos são extremamente coincidentes. Nas tabelas 15 e 16 os índices c estão extremamente concentrados na categoria "péssimo" enquanto os índices de P_i estão concentrados na categoria "mau" apesar da convergência deste se dar mais lentamente. No cenário anterior a concentração dos índices de P_i diferiram de c por apenas uma categoria abaixo, neste cenário houve uma inversão, os índices de P_i estão concentrados em uma categoria acima.

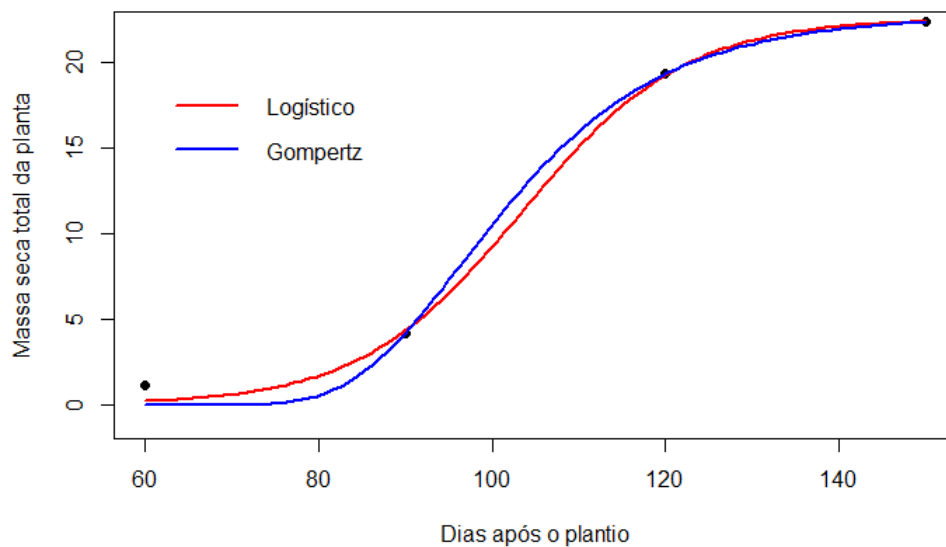
5 Aplicação à dados de crescimento de planta de alho

Na aplicação dos métodos estatísticos apresentados neste trabalho para análise de concordância, foram utilizados dois modelos Logístico e Gompertz. Inicialmente, foi simulado valores de uma distribuição uniforme entre 60 e 150 que representam respectivamente, o limite inferior e superior da variável independente gerando as estimativas $\hat{Y}_{Logístico}$ e $\hat{Y}_{Gompertz}$.

5.0.1 Ajuste do Modelo Logístico e Gompertz

Utilizando o método de análise gráfica para encontrar os chutes iniciais com o Software Geogebra e a função *nls* do R para estimar os parâmetros, o gráfico da figura 9 é gerado.

Figura 9: Modelos logístico e Gompertz ajustados



Fonte: O autor

A tabela 17 encontra-se os valores dos chutes iniciais, estimativas dos parâmetros, Soma de quadrados do resíduo e passos até convergência do algoritmo de estimação dos modelos Logístico e Gompertz. O modelo logístico tem o menor resíduo porém convergiu mais lentamente que o de Gompertz, verifica-se que as estimativas $\hat{\beta}_1$ e $\hat{\beta}_3$ são semelhantes para ambos os modelos sendo que tendo uma diferença acentuada na soma de quadrado do resíduo e tendo o maior valor para o modelo de Gompertz. Na figura 9 é notável a diferença das curvas do primeiro ao terceiro ponto o que indica uma diferença de poder preditivo nestes intervalos, do terceiro ao quarto ponto os valores preditivos são semelhantes.

Tabela 17: Chutes iniciais(β_i^a), estimativas dos parâmetros($\hat{\beta}_i$), Soma de quadrado do resíduo(SQres) e passos até a convergência

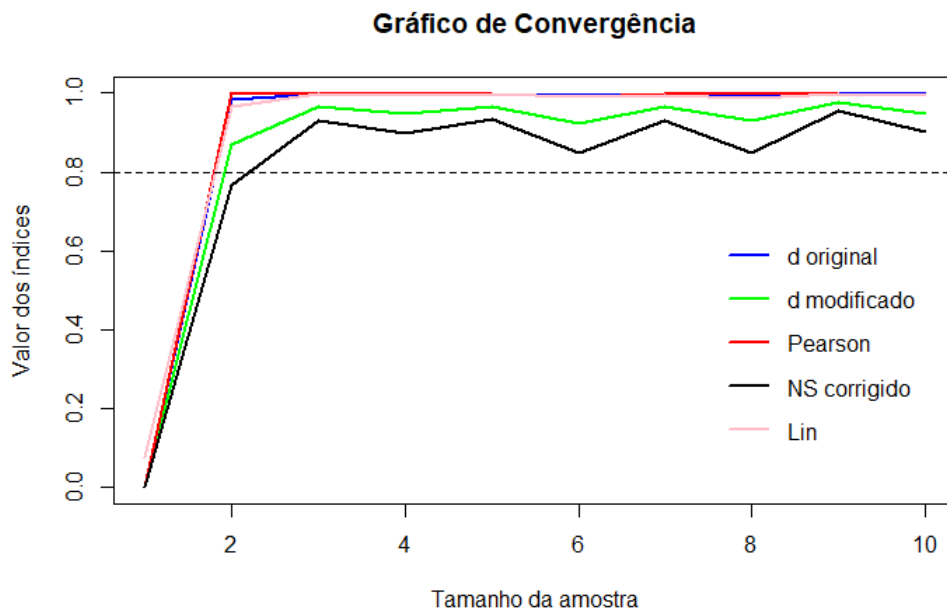
Modelos	β_1^a	β_2^a	β_3^a	$\hat{\beta}_1$	$\hat{\beta}_2$	$\hat{\beta}_3$	SQres	Convergência
Logístico	20	395,1	0,07	22,53	61180,0	0,10	0,877	16
Gompertz	23	900	0,07	22,67	1936,0	0,078	1,304	6

Fonte: O autor

5.0.2 índices de Willmott original, corrigido e refinado, Nash-Sutcliffe original e modificado, Coeficiente de Lin e Coeficiente de Pearson

O gráfico da figura 10 mostra os valores de 1 a 10 para simulação da distribuição uniforme utilizando-se de $runif(n, 60, 160)$ tal que n é o número de valores simulados, esse gráfico mostra um forte indicativo de concordância porque foi necessário no máximo 3 valores para a convergência de todos os índices e coeficientes, neste caso quanto menor for o ponto de convergência melhor, mas apesar disto será necessário usar mais valores para não prejudicar o Gráfico de Bland & Altman e algumas pressuposições de qualidade do ajustamento, n=10 para ser exato.

Figura 10: Convergência dos índices em relação ao tamanho de n



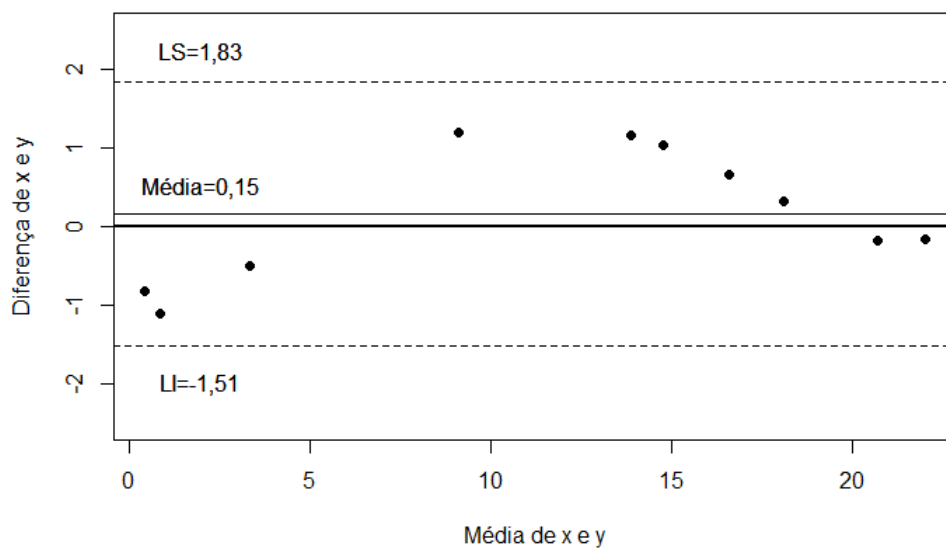
Fonte: O autor

Todos os índices apresentaram ótimos valores e apresentaram forte indícios de concordância entre os dois modelos de regressão, parte disto se deve a um bom ajuste dos modelos de regressão.

5.0.3 Gráfico de Bland-Altman

Analisando a concordância pelo gráfico de Bland-Altman na Figura 11, nota-se uma tendência na dispersão dos dados, apesar das outras condições estarem satisfeitas, o teste de Shapiro-Wilk foi não significativo (valor $p=0,3421$), o que implica a normalidade dos dados, subseqüentemente o teste t foi não significativo (valor $p=0.4539$), o que implica que a diferença entre as médias $\hat{Y}_{logístico}$ e $\hat{Y}_{Gompertz}$ é estatisticamente nula, e todos os dados estão nos limites de concordância.

Figura 11: Gráfico de Bland & Altman de $\hat{Y}_{logístico}$ e $\hat{Y}_{Gompertz}$



Fonte: O autor

5.0.4 Regressão Linear com e sem intercepto e Erro Quadrático médio.

Encontra-se, na Tabela 18, os resultados do teste de hipóteses sobre os parâmetros e os valores do Erro Quadrático Médio e sua decomposição sistemática e não sistemática, sendo que o maior valor do EQM não sistemático da regressão linear sem intercepto é referente a regressão linear sem intercepto, isto evidencia uma forte concordância entre os modelos.

Os itens 3 e 4 apresentaram a maior dificuldade computacional, pois foi necessário aplicar o teste de normalidade de Shapiro-Wilk para o resíduo da regressão linear com e sem intercepto, aplicou-se os testes t para as três condições a seguir:

- Parâmetros da regressão linear simples com intercepto;
- Parâmetros da regressão linear simples com intercepto e

Tabela 18: Estimativas dos Parâmetros da Regressão linear com e sem intercepto ($\hat{\beta}_i$) com seus respectivos valor p(p) e percentual do Erro Quadrático Médio sistemático(EQMs) e não sistemático(EQMn)

Regressão	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	EQMn(%)	EQMs(%)
RLS	0,58(p=0,24)	0,95(p=0,17)	78,26	21,74
RLS s intercepto	-	0,98(p=0,45)	93,69	6,3

Fonte: O autor

- Para dados pareados.

Como os valores usados para estes testes são gerados da variável resposta, cujo o domínio vem de dados simulados de uma distribuição uniforme, subsequentemente é só repetir a simulação n vezes até que todos os testes não rejeitem a hipótese de nulidade, das pressuposições de qualidade de ajuste, a homogeneidade de variâncias que foi a condição mais resistente de ser atendida.

6 Conclusão

O estudo de simulação mostrou divergência entre os índices de concordância quando expostos a baixa correlação de dados, e concordância entre todos os índices quando expostos a uma alta correlação de dados.

Os modelos Logístico e Gompertz são concordantes de acordo com todos os métodos estatísticos expostos neste trabalho com ressalva da análise de Bland & Altman por apresentar certa tendenciosidade na dispersão.

7 Referências

- ALVARES, C.A., STAPE, J.L, SENTELHAS, P.C., GONÇALVES, J.L.M. Modeling monthly mean air temperature for Brazil. **Theoretical and applied climatology**, Vienna, v. 113n. 3-4p. 407-427, 2013.
- BLAND, J. M., ALTMAN, D. Statistical methods for assessing agreement between two methods of clinical measurement. **Lancet**, London, v. 327, n. 8476, p. 307-310, 1986.
- BRITO, Fernando. **Ajuste na matéria seca (MS) da dieta de bovinos de corte**. 2017. Disponível em: <https://agrocereasmultimix.com.br/blog/ajuste-materia-seca/>. Acesso em: 25 Dez. 2019.
- BUSSAB, W. D. O., MORETTIN, P. A. **Estatística básica**. São Paulo: Saraiva, 2010. 540p.
- CAMARGO, A.P., SENTELHAS, P.C. Avaliação do desempenho de diferentes métodos de estimativa da evapotranspiração potencial no Estado de São Paulo, Brasil. **Revista Brasileira de Agrometeorologia**, Campina Grande, v.5 n.1, p. 89-97, 1997.
- FERREIRA, D.F., **Estatística Multivariada**. Lavras, Editora UFLA. 2008. 662p.
- FERREIRA, J.V. **Estatística experimental aplicada às ciências agrárias**. Viçosa, Editora UFV. 2018. 588p.
- FILHO; J.A.M, MALTAGLIATE, L.A.; TREVISAN, F.; GIL, C.T.L.A. Novo método estatístico para análise de reprodutibilidade. **Rev. Dent. Press Ortodon. Ortop. Facial**. Maringá, v. 10, n. 5, p. 122-129, 2005.
- HIRAKATA, V.N.; CAMEY, S.A. Análise de concordância entre métodos Bland-Altman. **Revista Hospital de clínicas de Porto Alegre**, Porto Alegre, v. 29, p. 261-268, 2009.
- JUNG, Carlos Fernando. **Metodologia Científica e Tecnológica**. Campinas: Unicamp, 2009. 58 slides, color. Disponível em: <http://www.dsce.fee.unicamp.br/ anterior/mod6.pdf>. Acesso em: 25 Dez. 2019.
- JÚNIOR, J.I.R. **Métodos estatísticos aplicados à melhoria de qualidade**. Vi-

çosa, Editora UFV, 2012, 385p.

KRAUSE, P., BOYLE, D.P., BASE, F. Comparison of different efficiency criteria for hydrological model assessment. **Advances in Geosciences**, 2005.

LIN, L.I. A Concordance Correlation Coefficient to Evaluate Reproducibility. **Biometrics**. v. 45 n.1 p.255-268, 1989.

LUNA, J.G., OLINDA, R.A. **Introdução a modelos lineares**. São Paulo. eduepb, 2014. 164p.

MAZUCHELI, J., ACHCAR, J.A. Algumas considerações em regressão não linear. **Acta Scientiarum**. Maringá, v. 24, n.6 p.1761-1770, 2002.

MIRANDA, A.C.R. **Métodos de separação dos escoamentos superficial direto e subterrâneo: Estudo de caso para a bacia do rio das velhas**. 2012. 83p. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Viçosa - UFV. Viçosa, 2012.

MOURA, F.A.; JACINTO, C.A.C.; FELICISSIMO, C.T.; PRUDÊNCIO, M.V.; MERCADANTE, L.A.; CUNHA, S.A. Concordância e correlação entre três métodos distintos para quantificação da altura do salto vertical. **Revista Brasileira de educação física e esporte**, São Paulo, p. 25-35, 2015.

OLIVEIRA, E.A. **Métodos para análise de concordância: estudo de simulação e aplicação a dados de evapotranspiração**. 2016. 177p. Tese (Doutorado) - Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiróz” – USP. Piracicaba, 2016.

PEREIRA, H.R., MESCHIATTI, M.C., PIRES, R.C.M., BLAIN, G.C. On the performance of three indices of agreement: an easy-to-use r-code for calculating the Willmott indices. **Agrometeorology**, Campinas, v. 77, n. 2, p.394-403, 2018

PRADO, T.K.L., SAVIAN, T.V., MUNIZ, J.A. Ajuste dos modelos Gompertz e Logístico aos dados de crescimento de frutos de coqueiro anão verde. **Ciência Rural**, Santa Maria, n.5, p. 803-809, 2013

REIS, G.G. **Análise de crescimento das plantas: mensuração do crescimento**. Pará. Embrapa, 1978. 23p.

REIS, R.M. **Modelos de regressão não linear para descrição do crescimento**

de plantas de alho. 55p. Tese(Mestrado). UFV. Viçosa, 2012.

SILVA, A.R. **Métodos de agrupamentos: Avaliação e aplicação ao estudo de divergência genética em acessos de alho.** 2012. 67p. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Viçosa - UFV. Viçosa, 2012.

SILVA, A.O., SANTOS, R.S.; FROTA, R.B.; SONSIN, A.R. Análise da relação entre dois diferentes métodos de mensuração para o saldo de radiação em uma região de pastagem no sudoeste da Amazônia. **XIX Congresso Brasileiro de Agrometeorologia,** Lavras, 2015.

SOUZA, G.S. **Introdução aos modelos de Regressão Linear e não Linear.** Brasília. Embrapa, 1998. 489p.

STEWART, JAMES. **Cálculo volume 2.** São Paulo. Cengage Learning, 2016. 672p.

TAGLIAFERRE, C. **Desempenho do Irrigâmetro e de dois minievaporatórios para estimativa da evapotranspiração de referência.** 99p. Tese(Doutorado). UFV. Viçosa, 2006.

TEAM,R.C. **R: A language and environment for statistical computing.** Vienna, R Foundation for Statistical Computing. 2019.

WILLMOTT, C. J.; ACKLESON, S. G.; DAVIS, R. E.; FEDDEMA, J. J.; KLINK, K. M.; LEGATES, D.R.; O'DONNELL, J.; ROWE, C.M. Statistics for the evaluation of model performance. **Journal of Geophysical Research,** Washington, v. 90, n. C5, p. 8995-9005,1985.

WILLMOTT, C. J., ROBESONB, S. M., MATSUURA, K. Short Communication: A Refined Index of Model Performance. **Intl. Journal of Climate,** Malden, v. 32, p. 2088-2094, 2012.